

---

**TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI**  
Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: N3901 – Aplikované vědy v inženýrství

Studijní obor: 3901T025 – Přírodovědné inženýrství

**Simulace zásaku a šíření železných nanočástic**

**Simulation of iron nanoparticle injection**

**Diplomová práce**

Autor: Bc. **Jakub Říha**

Vedoucí práce: Ing. Dana Rosická

Konzultant: doc. Ing. Jan Šembera, Ph.D.

V Liberci 20. 4. 2010

## **Originál zadání**

## **Prohlášení**

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum

Podpis

## **Poděkování**

Rád bych poděkoval své školitelce paní inženýrce Daně Rosické za podnětné rady a metodické pokyny týkající se konceptu a tvorby celé práce.

Dále bych rád poděkoval svému konzultantovi panu docentu Janu Šemberovi za cenné rady a čas, který mi věnoval.

Rád bych také poděkoval firmě Aquatest a.s., jmenovitě pak panu doktoru Petru Kvapilovi, za poskytnutí materiálů k modelované oblasti a za trpělivé zodpovídání mých dotazů.

Mé díky směřují také k zaměstnancům a studentům Technické univerzity v Liberci, kteří svými radami přispěli ke zdárnému dokončení této práce.

V neposlední řadě bych rád poděkoval své rodině za významnou pomoc a podporu během studia.

Jakub Říha

## **Abstrakt**

Tato diplomová práce pojednává o simulaci podzemního proudění, transportu kontaminace a zásaku železných nanočástic. Toto je motivováno snahou předvídat efektivitu sanačního zásahu. Na počátku práce jsou uvedeny některé fyzikální zákonitosti popisující proudění podzemní vody a transport látek v ní rozpuštěných. Následuje popis software, jenž byl pro simulaci použit. V další kapitole je stručně popsána simulace kolonového experimentu. Hlavní část této práce se pak zabývá simulací podzemního proudění, transportu kontaminace a zásaku nanoželeza zvolené reálné lokality. Výsledky simulací jsou porovnány s experimentálními daty a je zhodnocena jejich shoda.

Klíčová slova: Flow123D, proudění podzemní vody, transport,  $\text{Fe}^0$  nanočástice

## **Abstract**

This diploma thesis discusses the simulation of underground water flow, transport of contamination and iron nanoparticle injection. This is motivated by an effort to predict the effectivity of remediation intervention. At the beginning of this paper the physical laws describing the flow of underground water and the transport of its pollutants are introduced. This is followed by a description of software used for the simulation. In the next chapter, the simulation of column experiment is briefly depicted. The main part of this paper focuses on the simulation of underground water flow, transport of contamination and iron nanoparticle injection on the chosen real site. The results of simulations are compared with experimental data and the match is evaluated.

Keywords: Flow123D, underground water flow, transport,  $\text{Fe}^0$  nanoparticles

## Obsah

Seznam obrázků .....	8
Seznam tabulek.....	9
Použité značení.....	10
Seznam použitých zkratk.....	11
1. Úvod .....	12
2. Fyzikální model.....	14
2.1 Porézní prostředí.....	14
2.1.1 Zvodně.....	14
2.2 Fyzikální veličiny .....	15
2.2.1 Porozita.....	15
2.2.2 Hydraulická vodivost .....	16
2.2.3 Storativita .....	17
2.3 Proudění podzemních vod.....	17
2.3.1 Proudění v saturovaném prostředí.....	17
2.3.1.1 Darcyho zákon.....	17
2.3.1.2 Rovnice kontinuity .....	19
2.3.2 Proudění v nesaturovaném prostředí .....	19
2.3.3 Okrajové a počáteční podmínky.....	20
2.4 Transport v porézním prostředí .....	21
2.4.1 Advekce.....	22
2.4.2 Difuze/disperze.....	22
2.4.3 Advekčně-disperzní rovnice.....	24

2.4.4 Sorpce .....	24
2.4.4.1 Sorpční izotermy .....	25
2.4.5 Retardace .....	27
2.4.6 Okrajové a počáteční podmínky .....	28
3. Simulační software .....	30
3.1 Vstupní soubory .....	30
3.2 Výstupní soubory .....	31
4. Simulace kolony .....	33
5. Lokalita Kuřívody .....	37
5.1 Měření .....	38
5.2 Geometrie modelu .....	39
5.3 Proudový model .....	43
5.3.1 Okrajové a počáteční podmínky .....	43
5.3.2 Parametry proudového modelu a jejich kalibrace .....	45
5.3.3 Výstupy modelu a jejich zhodnocení .....	49
5.4 Transport kontaminace .....	58
5.5 Zásak nanoželeza .....	61
6. Závěr .....	70
Literatura .....	72

## Seznam obrázků

Obrázek 2.1: Freundlichova izoterma.....	26
Obrázek 2.2: Langmuirova izoterma .....	27
Obrázek 3.1: Vstupy a výstupy programu Flow123D .....	32
Obrázek 4.1: Srovnání výstupů modelu a experimentu .....	36
Obrázek 5.1: Horizontální řez modelovanou oblastí .....	39
Obrázek 5.2: Koncepční model zájmového území (vertikálně převýšeno 10x) .....	41
Obrázek 5.3: Geometrie modelované oblasti.....	42
Obrázek 5.4: Síť modelované oblasti.....	43
Obrázek 5.5: Schéma propojení UCODE s Flow123D .....	46
Obrázek 5.6: Vážená rezidua jednotlivých pozorování .....	51
Obrázek 5.7: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy A .....	53
Obrázek 5.8: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy B .....	54
Obrázek 5.9: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy C .....	55
Obrázek 5.10: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy R ...	56
Obrázek 5.11: Vektory filtrační rychlosti ve vertikálním řezu oblastí .....	57
Obrázek 5.12: Skutečný tvar kontaminačního mraku ve vrstvě A .....	60
Obrázek 5.13: Simulovaný tvar kontaminačního mraku ve vrstvě A .....	60
Obrázek 5.14: Horizontální vymezení nové geometrie .....	62
Obrázek 5.15: Geometrie pro zásak.....	63
Obrázek 5.16: Síť pro zásak.....	64
Obrázek 5.17: Filtrační rychlosti během zásaku (nahore) a během normálního provozu	68
Obrázek 5.18: Koncentrace nanoželeza po zásaku (nahore) a po třech měsících normálního provozu.....	69



## Seznam tabulek

Tabulka 1: Popis kolektorů.....	40
Tabulka 2: Parametry geometrie .....	42
Tabulka 3: Jednotky použité v modelu.....	43
Tabulka 4: Okrajové podmínky proudění .....	44
Tabulka 5: Parametry modelu a jejich hodnoty.....	49
Tabulka 6: Naměřené a simulované hodnoty piezometrických výšek v bodech pozorování .....	50
Tabulka 7: Vodní bilance .....	58
Tabulka 8: Souřadnice a parametry použitých vrtů.....	62
Tabulka 9: Okrajové podmínky pro proudění .....	64
Tabulka 10: Distribuční koeficienty z kolonových experimentů .....	67

## Použité značení

V seznamu je užíváno výhradně jednotek SI a to tak, že  $L$  značí jednotku délky,  $T$  jednotku času a  $M$  jednotku hmotnosti.

Symbol	Jednotka	Význam
$b$	1	Freundlichův exponent
$c$	$M \cdot L^{-3}$	Koncentrace
$\hat{c}$	1	Hmotnostní koncentrace
$\mathbf{D}_f$	$L^2 \cdot T^{-1}$	Tenzor mechanické disperze
$\mathbf{D}_h$	$L^2 \cdot T^{-1}$	Tenzor hydrodynamické disperze
$\mathbf{D}_m$	$L^2 \cdot T^{-1}$	Tenzor molekulární difuze
$E(X)$	-	Střední hodnota veličiny X
$g$	$L \cdot T^{-2}$	Tíhové zrychlení
$H$	$L$	Výška hladiny
$h$	-	Naměřená hodnota pozorování
$h'(b)$	-	Simulovaná hodnota pozorování
$\mathbf{K}$	$L \cdot T^{-1}$	Tenzor hydraulické vodivosti
$k_D$	1	Bezrozměrný distribuční koeficient
$K_D$	$L^3 \cdot M^{-1}$	Distribuční koeficient
$K_F$	$L^3 \cdot M^{-1}$	Freundlichův distribuční koeficient
$K_L$	$L^3 \cdot M^{-1}$	Langmuirův distribuční koeficient
$L$	$L$	Charakteristický rozměr úlohy
$n$	1	Porozita
$NO$	1	Počet pozorování
$NP$	1	Počet parametrů
$NPR$	1	Počet apriorních informací
$p$	$L$	Tlaková výška
$P$	$L^3 \cdot T^{-1}$	Hustota zdrojů či propadů
$Pe$	1	Pécletovo číslo
$Q$	$L^3 \cdot T^{-1}$	Okamžitý průtok
$R$	1	Retardační koeficient
$R$	$T \cdot L^{-1}$	Hydraulický odpor
$Re$	1	Reynoldsovo číslo
$s$	$M \cdot L^{-3}$	Sorbovaná koncentrace
$\bar{s}$	1	Standardní chyba regrese
$\bar{s}^{-2}$	1	Rozptyl vypočtené chyby
$s^{\max}$	$M \cdot L^{-3}$	Maximální sorbovaná koncentrace
$S$	1	Saturace
$s(p)$	1	Koeficient storativity
$S(b)$	1	Účelová funkce
$T$	$L^2 \cdot T^{-1}$	Transmisivita
$\mathbf{T}$	1	Tenzor tortuozity
$\vec{u}$	$L \cdot T^{-1}$	Filtrační rychlost

$\vec{u}_C^{ADV}$	$M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$	Advekční tok
$\vec{u}_C^{DISP}$	$M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$	Disperzní tok koncentrace
$\vec{v}$	$L \cdot T^{-1}$	Pórová rychlost
$V_0$	$L^3$	Pórový objem
$\alpha_L$	$L$	Koeficient podélné disperzivity
$\alpha_T$	$L$	Koeficient příčné disperzivity
$\theta$	1	Vodní obsah
$\mu$	$M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$	Dynamická viskozita
$\pi$	$M \cdot L^{-1} \cdot T^{-2}$	Dynamická složka tlaku
$\rho$	$M \cdot L^{-3}$	Hustota
$\sigma$	$T^{-1}$	Koeficient přestupu
$\sigma^2$	-	Rozptyl
$\Phi$	$L$	Piezometrická výška
$\omega$	-	Váha pozorování

### Seznam použitých zkratk

ASCII	Americký standardní kód pro výměnu informací
CEV	Rozptyl vypočtené chyby
ČSSR	Československá socialistická republika
MEV	Maximální elementární objem
MFP	Molekulární forma prvků
MKO	Metoda konečných objemů
OKP	Okrajové podmínky
REV	Reprezentativní elementární objem
SH-MKP	Směšená hybridní metoda konečných prvků
SI	Mezinárodní soustava jednotek
TUL	Technická univerzita v Liberci

## 1. Úvod

Matematika je často nazývána jazykem vesmíru. S její pomocí můžeme popsat a předvídat chování věcí kolem nás. Užití matematiky k popsání nějakého systému se nazývá matematické modelování. S rozvojem levných a dostupných počítačů v posledních desetiletích proniklo matematické modelování do většiny technických věd. Může hrát významnou roli také v různých fázích sanačního zásahu, jako je analýza proveditelnosti, jeho návrh a monitoring.

Na Ústavu nových technologií a aplikované informatiky Fakulty mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci je vyvíjen program Flow123D, který umožňuje řešení úlohy proudění podzemní vody v heterogenním horninovém prostředí a transportu látek v ní rozpuštěných. Užitím tohoto programu lze simulovat hydrologii kontaminované oblasti, což nám umožní předvídat efektivitu sanačního zásahu.

Práce je tematicky členěna do čtyř základních celků. V první části jsou položeny fyzikální základy, na kterých je hydrologický model vystavěn. Jsou zde popsány veličiny charakterizující horninové prostředí a vztahy mezi nimi. Zvláštní pozornost je věnována vztahům popisujícím proudění podzemních vod v saturovaném a nesaturovaném prostředí a transport látek v podzemní vodě rozpuštěných.

V další části je stručně charakterizován použitý simulační software. Při tvorbě této práce byl využit, jak už svrchu uvedeno, program Flow123D. Jsou zde popsány všechny jeho vstupní a výstupní soubory.

Třetí částí je popis simulace kolonového experimentu. Je zde stručně popsána geometrie kolony, parametry horniny, již je naplněna, a okrajové podmínky proudění a transportu. Cílem tohoto je ověření možností programu Flow123D při simulaci migrace nanoželeza na jednoduchém experimentu.

Hlavní část této práce se zabývá simulací proudění podzemní vody, transportu kontaminace a šíření zasáknutých železných nanočástic na reálné lokalitě. Jedná se o lokalitu Kuřívody, jejíž část je kontaminována chlorovanými uhlovodíky. Na lokalitě už sanační práce probíhají, je relativně dobře prozkoumaná a tedy pro

účely této práce vhodná. V této kapitole je o oblasti stručně pojednáno, větší pozornost je pak věnována popisu její simulace. Zmíněna je tvorba její geometrie a definice okrajových podmínek. Velice důležitou částí této kapitoly je popis kalibrace parametrů. Výsledky simulace jsou srovnávány s experimentálními daty a je zde hodnocena jejich shoda.

## 2. Fyzikální model

Tato kapitola se zabývá popisem horninového prostředí, fyzikálních veličin v něm vystupujících a vztahy mezi nimi.

### 2.1 Porézní prostředí

Podzemní prostor není spojitě vyplněný zeminou, mezi částicemi pevné látky existují volná místa vyplněná kapalinou nebo plynem. Tato volná místa se nazývají póry. Protože přesný popis dějů v porézním prostředí by byl z důvodu mikroskopické struktury složitý, uvažujeme o porézním prostředí jako o kontinuu. Zavádíme pojem reprezentativního elementárního objemu (REV), což je nejmenší možný objem, na kterém lze provést měření poskytující hodnoty odpovídající celku. S objemy menšími než REV nelze pracovat jako s kontinuem. Abychom určili vlastnosti porézního prostředí, musíme proměřit jeho vzorky. Jsou-li však vzorky příliš malé, výsledky měření mají sklon oscilovat. S tím, jak zvětšujeme velikost vzorku, se oscilace tlumí až do okamžiku, kdy je velikost vzorku dostatečná pro to, aby byly výsledky měření konzistentní. Právě taková velikost vzorku se označuje jako REV. Velikost vzorku však nelze zvětšovat do nekonečna, neboť při určité velikosti může začít zasahovat do jiných hydrostratigrafických vrstev (takové vrstvy mají odlišné chemické složení nebo fyzikální vlastnosti podzemních vod). Velikost vzorku, kdy toto nastane, se nazývá maximální elementární objem (MEV). Veličiny popisující porézní prostředí jsou pomocí REV definovány vztahem:

$$\alpha = \frac{1}{V} \int_V \alpha^{mic} dV ,$$

ten průměruje mikroskopickou veličinu (koncentrace, tlak, ...)  $\alpha^{mic}$  přes objem REV.

#### 2.1.1 Zvodně

Dalším definovaným pojmem je zvodně. Jedná se o podzemní vrstvu horniny nebo neztvrdlých materiálů (písek, štěrk, hlína,...), která je dostatečně saturovaná a propustná na to, aby dokázala přivádět ekonomicky využitelné

množství vody ke studnám nebo vrtům. Zavedeme si pojem saturace. Jedná se o bezrozměrnou veličinu, kterou lze vypočíst dle vztahu:

$$S = \frac{\text{objem vody v REV}}{\text{objem pórů v REV}}.$$

Zvodně se pak dají rozdělit následujícím způsobem:

1. Zvodeň s napjatou hladinou – je to taková zvodeň, na jejíž horní hranici je hydrostatický tlak vyšší než tlak atmosférický. Je z obou stran, shora i zdola, ohraničena izolátory, což jsou vrstvy s velmi malou hydraulickou vodivostí. Je zcela saturovaná ( $S=1$ ), všechny póry jsou tedy zaplněny kapalinou. Je-li stropní izolátor nějakým způsobem (například studnou nebo vrtem) narušen, hladina podzemní vody vystoupá nad jeho úroveň.
2. Zvodeň s volnou hladinou – je to taková zvodeň, ve které hladina podzemní vody leží níže než strop kolektoru. Na hladině je tlaková výška rovna nule, hydrostatický tlak pak roven tlaku atmosférickému. Výška hladiny podzemní vody se často s časem mění, což je zapříčiněno například proměnným množstvím srážek. Nad hladinou podzemní vody již nejsou póry plně zaplněny kapalinou, vzniká tam takzvaná nesaturovaná zóna ( $S \in (0,1)$ ). To, že se v pórech nad hladinou podzemní vody nachází kapalina, je důsledkem kapilárních sil.

## 2.2 Fyzikální veličiny

Tato kapitola se bude zabývat popisem nejdůležitějších veličin charakterizujících porézní prostředí.

### 2.2.1 Porozita

Porozita je bezrozměrná veličina, obvykle se značí  $n$ . Rozlišujeme tři její druhy:

- 1) Celková porozita udávající objem volných pórů vzhledem k celkovému objemu materiálu. Používá se při výpočtech transportu roztoků.

$$n = \frac{\text{objem pórů v REV}}{\text{objem REV}}.$$

- 2) Aktivní (mobilní) porozita udávající objem průtočných (mobilních) pórů vzhledem k celkovému objemu materiálu. Používá se při výpočtech rychlosti proudění podzemní vody. Odečteme-li její hodnotu od hodnoty celkové porozity, dostaneme porozitu imobilní.
- 3) Efektivní porozita udávající objem vody, který vyteče z 1  $m^3$  horniny vlivem působení gravitační síly. Ta se uplatní při výpočtech neustáleného proudění v oblastech s volnou hladinou.

### 2.2.2 Hydraulická vodivost

Hydraulická vodivost charakterizuje schopnost půdy vést vodu. Udává se v jednotkách délky na jednotku času [ $L \cdot T^{-1}$ ], obvykle se značí  $\mathbf{K}$ . Je závislá na velikosti, tvaru a obsahu pórů:

$$\mathbf{K} = C \cdot f(n) \cdot d_m^2,$$

kde  $C$  je parametr charakterizující tvar zrn zeminy,  $d_m$  je jejich účinný průměr a  $f(n)$  je funkce porozity. Hydraulická vodivost může nabývat různých hodnot v různých směrech (takové prostředí se pak nazývá anizotropní). Především horizontální a vertikální hydraulická vodivost se mohou lišit až o několik řádů. Důsledkem této směrovosti je, že se s hydraulickou vodivostí počítá jako se symetrickým tenzorem druhého řádu. Jsou-li osy anizotropie shodné se souřadnými osami, je výše zmíněný tenzor diagonální. Zavádí se také tenzor hydraulického odporu, který je k tenzoru hydraulické vodivosti inverzní a značí se  $R$ . Přesnost stanovení hydraulické vodivosti je základním předpokladem pro úspěšné řešení problému proudění podzemní vody. S hydraulickou vodivostí souvisí transmisivita (průtočnost) vyjadřující schopnost zvodně propouštět podzemní vodu. Naznačuje možnosti vodohospodářského využití podzemních vod. Udává se v jednotkách délky v kvadrátu na jednotku času [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ] a dá se vypočítat pomocí následujícího vztahu:

$$T_i = K_i \cdot H,$$

kde  $K_i$  je hydraulická vodivost a  $H$  je výška hladiny nad povrchem nepropustného podloží. Nesaturovaná část zvodně k transmisivitě nepřispívá.



### 2.2.3 Storativita

Storativita (zásobnost) je schopnost horniny přijmout či uvolnit určitý objem podzemní vody při změně piezometrického napětí. Vyjadřuje se koeficientem storativity, který je definován jako objem vody, který se uvolní z jednotkové plochy při jednotkovém snížení piezometrické hladiny. Tento koeficient se obvykle označuje  $s(p)$  a je bezrozměrný. Uplatňuje se při výpočtu neustáleného proudění, kde pro nasycenou část je  $s(p)$  velmi malé (hodnoty řádu  $10^{-4} - 10^{-6}$ ) a odpovídá stlačitelnosti vody a případné konsolidaci horniny, zatímco pro část nenasyčenou je  $s(p)$  řádově vyšší (hodnoty řádu  $10^{-1} - 10^{-2}$ ).

## 2.3 Proudění podzemních vod

V této kapitole popíšeme vztahy mezi rychlostí proudění, tlakem, tlakovou výškou a piezometrickou výškou, což jsou veličiny důležité pro výpočet proudění a tedy i transportu.

### 2.3.1 Proudění v saturovaném prostředí

Prostředí je saturované, jsou-li všechny póry zaplněny kapalinou. Proudění kapaliny v saturovaném prostředí je popsáno pomocí Darcyho zákona a rovnice kontinuity (rovnice balance hmoty).

#### 2.3.1.1 Darcyho zákon

Darcyho zákon je fenomenologicky odvozený vztah, který definuje rychlost průtoku kapaliny nebo plynu porézním prostředím:

$$\vec{u} = -\mathbf{K} \cdot \vec{\nabla} \Phi,$$

kde  $\vec{u}$  je filtrační (darcyovská) rychlost,  $\mathbf{K}$  je tenzor hydraulické vodivosti a  $\Phi$  je piezometrická výška. Znaménko mínus je ve vztahu proto, že kapaliny proudí z míst s vyšším tlakem do míst s tlakem nižším. Vedle filtrační rychlosti se zavádí ještě rychlost pórová (intersticiální). Ta se z rychlosti filtrační získá vydělením porozitou, což reflektuje fakt, že pouze část celkového objemu lze využít pro proudění:

$$v = \frac{u}{n}.$$

Obě dvě výše zmíněné rychlosti se udávají v jednotkách délky na jednotku času  $[L \cdot T^{-1}]$ .

Piezometrická výška v sobě zahrnuje potenciál tíhového pole daný z-ovou souřadnicí a potenciál tlaku:

$$\Phi = p + z,$$

kde  $p$  je tlaková výška, která má význam tlaku vyjádřeného v délkových jednotkách:

$$p = \frac{\pi}{\rho \cdot g},$$

kde  $\pi$  označuje dynamickou složku tlaku,  $\rho$  je hustota kapaliny a  $g$  je tíhové zrychlení. Zatímco tlak se udává v pascálech, tlaková výška a piezometrická výška se udávají v metrech.

Vynásobíme-li filtrační rychlost plochou a vydělíme-li ji porozitou, dostaneme okamžitý průtok porézním prostředím, který se označuje  $Q$  a udává se v jednotkách délky krychlových na jednotku času  $[L^3 \cdot T^{-1}]$ .

$$Q = \frac{u \cdot S}{n}.$$

Lineární Darcyho zákon nelze použít vždy. Jeho platnost je omezena shora i zdola. Zdola je omezena existencí molekulárních sil, které, při nízkých gradientech tlaku, proudění zpomalují nebo dokonce zcela znemožňují. Shora je platnost Darcyho zákona omezena pouze na laminární proudění, pro turbulentní proudění ztrácí přesnost. Je-li proudění laminární nebo turbulentní, lze určit z Reynoldsova čísla, které se dá pro proudění v porézním prostředí vyjádřit jako:

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot u \cdot d_{30}}{\mu},$$

kde  $\rho$  je hustota kapaliny,  $u$  je filtrační rychlost,  $d_{30}$  je charakteristický rozměr zrn a  $\mu$  je dynamická viskozita kapaliny. Jedná se bezrozměrný parametr. Darcyho zákon lze použít pro hodnoty Reynoldsova čísla menší než deset.

### 2.3.1.2 Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity vyjadřuje, že v libovolném objemu musí změna hmotnosti kapaliny odpovídat množství kapaliny prošlé přes hranici a změně hmotnosti vzešlé ze zdrojů respektive propadů. Hmotnost tedy nemůže vznikat ani zanikat, může se jen přesouvat z místa na místo. Rovnici kontinuity lze vyjádřit v integrálním tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \cdot n) dV = - \int_{\partial V} (\rho \cdot \vec{u} \cdot \vec{n}) dS + \int_V P \cdot \rho dV,$$

kde  $P$  je hustota zdrojů či propadů vyjádřená jako objem kapaliny vtlačený do jednotkového objemu za jednotku času [ $L^3 \cdot T^{-1}$ ],  $n$  je porozita a  $\vec{n}$  je vektor jednotkové vnější normály. Užitím Gaussovy věty lze tuto rovnici převést do diferenciálního tvaru:

$$\frac{\partial(\rho \cdot n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = P \cdot \rho.$$

Počítáme-li s prostředím bez zdrojů, kde navíc předpokládáme konstantní hustotu (nestlačitelná kapalina) a porozitu (nestlačitelné prostředí), dostaneme:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

### 2.3.2 Proudění v nesaturovaném prostředí

Póry v nesaturovaném prostředí jsou zaplněny jak kapalinou, tak i plynem. V nesaturovaném prostředí je tlaková výška záporná. Proudění je popsáno Richardsovou rovnicí, kterou lze odvodit dosazením z Darcyho zákona

$$\vec{u} = -\mathbf{K}(\theta) \vec{\nabla} \Phi$$

do rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

Richardsovu rovnici lze pak vyjádřit ve tvaru:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}(\theta) \vec{\nabla} \Phi),$$

kde  $\theta$  označuje vodní obsah ( $0 \leq \theta \leq n$ ), který se dá vyjádřit jako:

$$\theta = \frac{\text{objem vody v REV}}{\text{objem REV}}.$$

Vodní obsah dostaneme, vynásobíme-li saturaci porozitou:

$$\theta = n \cdot S.$$

Jak patrně, v nesaturovaném prostředí je hydraulická vodivost funkcí vodního obsahu. S klesajícím vodním obsahem dramaticky klesá také hydraulická vodivost podle následujícího nelineárního vztahu:

$$\mathbf{K}(\theta) = \mathbf{K}_s \left( \frac{\theta - \theta_R}{\theta_s - \theta_R} \right)^a,$$

kde  $\mathbf{K}_s$  je hydraulická vodivost v saturovaném prostředí,  $\theta_s$  je vodní obsah saturovaného prostředí,  $\theta_R$  je zbytkový vodní obsah a  $a$  je parametr závislý na druhu zeminy. Richardsova rovnice je nelineární parciální diferenciální rovnice druhého řádu v prostoru a prvního řádu v čase, je tedy poměrně obtížně řešitelná.

### 2.3.3 Okrajové a počáteční podmínky

Abychom mohli řešit úlohu ustáleného proudění, které je nezávislé na čase, je třeba definovat okrajové podmínky. Ty jsou trojího druhu:

1. Dirichletova okrajová podmínka – její pomocí se zadává tlaková výška na části hranice se známou výškou hladiny podzemní vody označované  $\Gamma_D$ . Zadává se ve tvaru:

$$p = p_D,$$

kde  $p_D$  je výše zmíněná tlaková výška.

2. Neumannova okrajová podmínka – její pomocí se zadává normálový průtok jednotkovou plochou na části hranice označované  $\Gamma_N$ . Zadává se ve tvaru:

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = u_N,$$

kde  $\vec{n}$  je jednotkový vektor vnější normály a  $u_N$  je skalární funkce označující tok kapaliny hranicí. Častým případem je homogenní Neumannova podmínka, kdy  $u_N = 0$ . Ta se používá na nepropustné části hranice. Je třeba pamatovat na to, že Neumannova okrajová podmínka nesmí být definována na celé hranici modelu, protože to by vedlo k nejednoznačnosti řešení.

3. Newtonova (Cauchyho) okrajová podmínka – na zbývajících částech hranice, označované  $\Gamma_T$ , kde je identifikace výšky hladiny nebo toku hranicí obtížná, se předepisuje Newtonova okrajová podmínka ve tvaru:

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = \sigma \cdot (p - p_T),$$

kde  $\sigma$  označuje koeficient přechodu a  $p_T$  je vnější tlaková výška. Tato okrajová podmínka simuluje průtok kapaliny polopropustnou překážkou.

V případě neustáleného proudění je třeba navíc nadefinovat počáteční podmínky, které v daném časovém okamžiku určují hodnoty tlaků na celé oblasti, na které rovnici řešíme.

## 2.4 Transport v porézním prostředí

Existuje mnoho mechanismů, jimiž probíhá transport v porézním prostředí. V dalším textu popíšeme nejdůležitější z těchto mechanismů. Nejprve však zavedeme pojem koncentrace. Ta se dá vyjádřit trojím způsobem:

1. Hmotnost rozpuštěné látky připadající na jednotkový objem kapaliny:

$$c = \frac{m_l}{V_{kap}} \cdot [M \cdot L^{-3}]$$

2. Hmotnost rozpuštěné látky připadající na jednotkovou hmotnost kapaliny (tzv. hmotnostní koncentrace).

$$\hat{c} = \frac{m_l}{m_{kap}} \cdot [1]$$

3. Hmotnost rozpuštěné látky připadající na jednotkový objem porézního prostředí. Tu lze vypočíst z koncentrace popsané v bodě 1 vynásobením porozitou:

$$\tilde{c} = n \cdot c \cdot [M \cdot L^{-3}]$$

#### 2.4.1 Advekce

Pro advekci se často užívá též termín konvekce. Advekcí se rozumí transport látky spolu s pohybující se podzemní vodou. Množství transportované látky odpovídá filtrační rychlosti proudění podzemní vody dle vztahu:

$$\vec{u}_c^{ADV} = \vec{v} \cdot c,$$

kde  $\vec{u}_c^{ADV}$  je advekční tok vyjadřující množství látky prošlé jednotkovou plochou za jednotku času.

#### 2.4.2 Difuze/disperze

Difuze je mechanismus, kterým se částice látky přesouvají z míst o větší koncentraci do míst o koncentraci nižší. V porézním prostředí se toto projevuje jako molekulární difuze a mechanická disperze.

Molekulární difuze představuje transport látky proti směru gradientu koncentrace. Je také ovlivněna mikroskopickou strukturou prostředí. Její intenzita nezávisí na rychlosti proudění. Je popsána Druhým Fickovým zákonem, který ukazuje, jak se koncentrace vlivem difuze mění s časem:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_m \cdot \sum_i \frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2} = D_m \cdot \Delta c,$$

kde  $D_m$  je skalární difuzní koeficient, který je různý pro různé látky a udává se v jednotkách délky čtverečních na jednotku času  $[L^2 \cdot T^{-1}]$ . V porézním prostředí je třeba předpokládat, že dráha difundující částice bude v důsledku přítomnosti částic zeminy zakřivená. Toto ovlivnění difuze geometrií pórů je vyjádřeno tenzorem tortuozity  $\mathbf{T}$ . Ten je v izotropním prostředí diagonální s tím, že všechny jeho složky jsou si rovny. S jeho pomocí se zavádí tenzor molekulární difuze jako

$$\mathbf{D}_m = D_m \cdot \mathbf{T}.$$

Proudění podzemní vody probíhá při rychlostech, které jsou obecně jak větší, tak i menší než rychlost průměrná. Toto má tři příčiny:

1. Uprostřed póru je proudění rychlejší než na jeho okraji.
2. Dvě částice mohou z bodu A do bodu B putovat po různých drahách, které mohou být různě dlouhé.
3. Póry mají různou velikost. Ve větších pórech je možné dosáhnout větší rychlosti.

Důsledkem této nehomogenity rychlostí je míchání, které je označováno jako mechanická disperze. Míchání ve směru rychlosti proudění se nazývá podélná mechanická disperze ( $\alpha_L$ ), míchání ve směru kolmém ke směru rychlosti se nazývá příčná mechanická disperze ( $\alpha_T$ ). Průběh mechanické disperze lze popsat vztahem, který je formálně shodný s Fickovým zákonem, ale s jinak vyjádřeným koeficientem. Ten se nazývá tenzor mechanické disperze a je závislý na průměrné rychlosti proudění dle vztahu:

$$[\mathbf{D}_f]_{i,j} = \alpha_T \cdot |\vec{v}| \cdot \delta_{i,j} + (\alpha_L - \alpha_T) \cdot \frac{v_i \cdot v_j}{|\vec{v}|}.$$

Výsledný děj složený z molekulární difuze a mechanické disperze se nazývá hydrodynamická disperze. Je charakterizován tenzorem hydrodynamické disperze, který lze spočítat jako:

$$\mathbf{D}_h = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_f.$$

Charakter hydrodynamické disperze udává bezrozměrné Péceletovo číslo

$$Pe = \frac{|\vec{v}| \cdot d}{\|\mathbf{D}_m\|},$$

kde  $d$  je charakteristický rozměr zrn. Je-li  $Pe < 0.01$ , převládá molekulární difuze. Je-li  $Pe > 10000$ , převládá mechanická disperze. Molekulární difuzi lze obvykle zanedbat už pro  $Pe > 20$ .

Z Prvního Fickova zákona pak můžeme definovat disperzní tok koncentrace

$$\vec{u}_c^{DISP} = -\mathbf{D}_h \cdot \vec{\nabla} c.$$

### 2.4.3 Advekčně-disperzní rovnice

Transport látky unášené kapalinou popisuje advekčně-disperzní rovnice, která je formou zákona zachování hmoty. V obecném případě ji lze psát ve tvaru:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u}_c = 0,$$

kde tok koncentrace  $\vec{u}_c$  má dvě složky: advekční a disperzní. Dosadíme-li nyní za  $\vec{u}_c$ :

$$\vec{u}_c = \vec{u}_c^{ADV} + \vec{u}_c^{DISP},$$

dostaneme:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{u}_c^{ADV} + \vec{u}_c^{DISP}) = -\nabla \cdot (\vec{v} \cdot c) + \nabla \cdot (D_m \cdot \vec{\nabla} c).$$

Poměr advekce a disperze dává do souvislosti opět bezrozměrné Pécletovo číslo, které v tomto případě vyjádříme jako:

$$Pe = \frac{|\vec{v}| \cdot L}{\|D\|},$$

kde  $L$  [L] je charakteristický rozměr úlohy.

### 2.4.4 Sorpce

Sorpce je interakce mezi roztokem a horninou. Je složena ze tří různých dějů:

1. adsorpce – zachycování migrující látky na povrchu horniny,
2. absorpce – vstřebání se migrující látky do matrice horniny,
3. desorpce – zpětné uvolňování sorbované látky do roztoku, jedná se o jev inverzní k adsorpci.

Nyní zavedeme veličiny potřebné pro kvantitativní popis sorpce. Hmotnost sorbované látky lze vztáhnout buď na jednotkový objem pevné fáze (označíme  $s$ )



nebo na jednotkový objem porézního prostředí (označíme  $\tilde{s} = (1-n) \cdot s$ ) anebo na jednotkovou hmotnost pevné fáze (označíme  $\bar{s} = s/\rho_s = \tilde{s}/(1-n) \cdot \rho_s$ , kde  $\rho_s$  je hustota pevné fáze a  $\rho_b = (1-n) \cdot \rho_s$  je objemová hmotnost porézního prostředí). Sorpce je pak popsána vztahem mezi sorbovanou hmotností a koncentrací látky v roztoku. Sorpci lze rozdělit na:

1. Rovnovážnou – mezi látkou sorbovanou na pevné fázi a látkou rozpuštěnou v roztoku dojde vždy k ustavení rovnováhy. Existuje tedy algebraický vztah mezi  $c$  a  $s$ .
2. Nerovnovážnou – změna koncentrace vlivem transportu je srovnatelně rychlá jako přesun látky mezi roztokem a horninou. Sorbované množství v takovém případě nezávisí jen na koncentraci látky v roztoku ale i na čase. Rovnováha se tedy neustálí a sorpce je popsána rychlostí přibližování systému k rovnovážnému stavu jako funkce  $c$  i  $s$ .

Každý sorpční děj je ve skutečnosti nerovnovážný. To lze zanedbat pouze v případě, kdy se  $c$  mění dostatečně pomalu, nebo když časové měřítko pozorování je mnohem větší než časová konstanta děje.

#### 2.4.4.1 Sorpční izotermy

Rovnovážný stav mezi  $s$  a  $c$  za konstantní teploty popisují sorpční izotermy. Těch existuje velké množství, my v dalším textu popíšeme tři nejběžnější.

1. Lineární izoterma – jedná se o nejjednodušší aproximaci sorpčního děje. Nebere v potaz saturaci ani různě zaplněný stav povrchu materiálu pevné fáze. Matematicky je popsána takto:

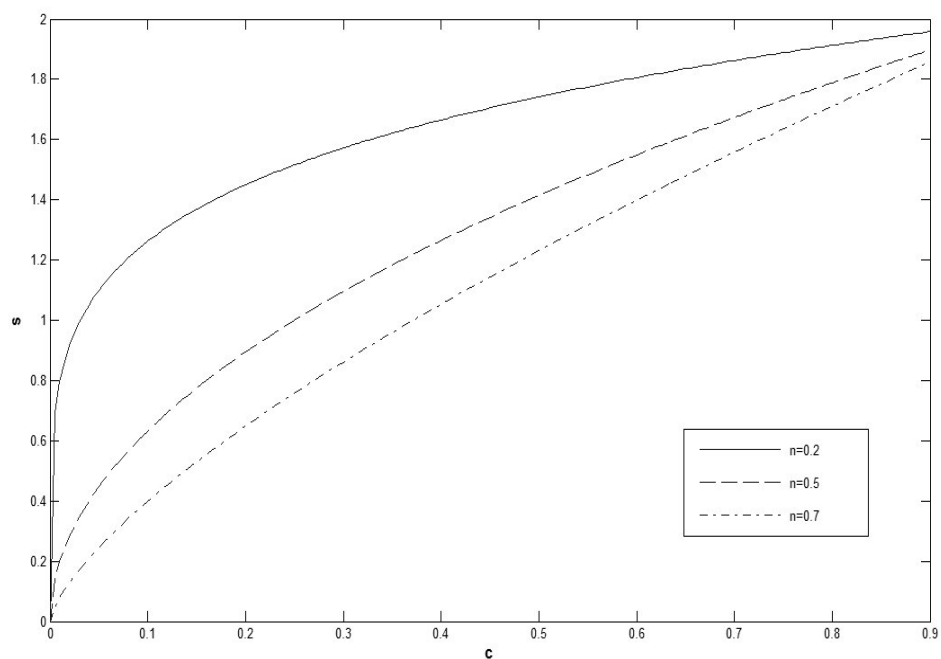
$$s = k_D \cdot c = \rho_s \cdot K_D \cdot c,$$

kde  $K_D$  je distribuční koeficient [ $L^3 \cdot M^{-1}$ ]. Vykreslíme-li izotermu do grafu, dostaneme přímku.

2. Freundlichova izoterma – jedná se o nelineární aproximaci sorpčního děje. Nebere v potaz saturaci a v počátku má nekonečnou směrnici. Matematicky je popsána takto:

$$s = k_F \cdot c^b = \rho_s \cdot K_F \cdot c^b,$$

kde  $K_F$  je Freundlichův distribuční koeficient [ $L^3 \cdot M^{-1}$ ] a  $b$  je Freundlichův exponent, který se reálně pohybuje v intervalu  $\langle 0,1; 0,9 \rangle$ . Graf Freundlichovy izotermy pro různá  $n$  a pro  $K_F=2$  je znázorněn na Obrázku 2.1.



**Obrázek 2.1: Freundlichova izoterma**

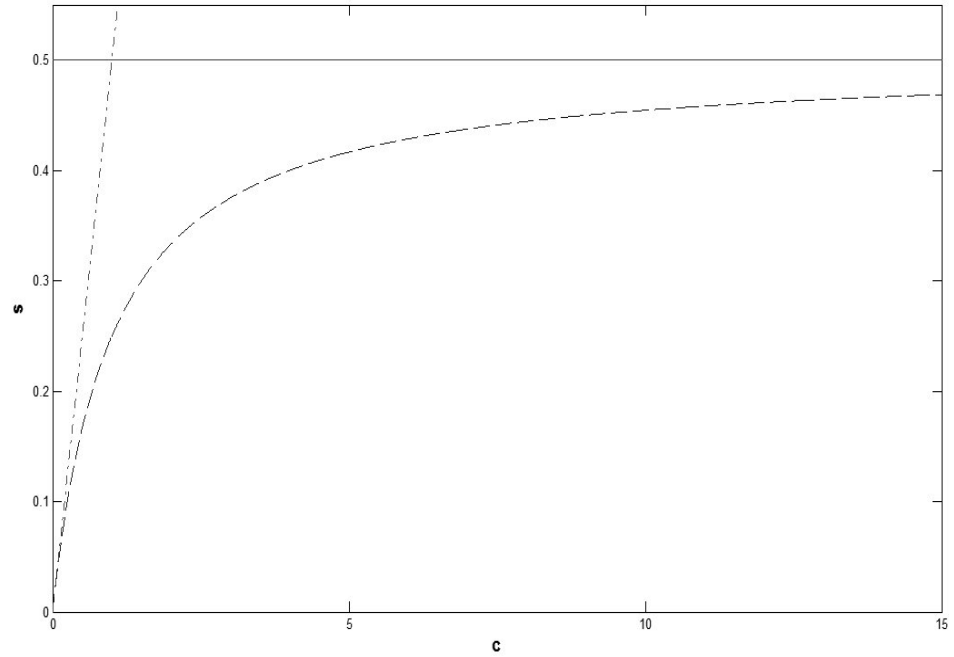
Izoterma může být linearizována zlogaritmováním:

$$\log s = \log k_F + n \cdot \log c.$$

3. Langmuirova izoterma – jedná se opět o nelineární aproximaci sorpčního děje. Na rozdíl od dvou výše popsanych ale uvažuje saturaci materiálu pevné fáze. Matematicky je popsána takto:

$$s = \frac{K_L \cdot s^{\max} \cdot c}{1 + K_L \cdot c},$$

kde  $s^{\max}$  je maximální sorbovaná koncentrace a  $K_L$  je Langmuirův distribuční koeficient [ $L^3 \cdot M^{-1}$ ]. Graf Langmuirovy izotermy pro  $s^{\max}=0,5$  a  $K_L=1$  je znázorněn na Obrázku 2.2.



**Obrázek 2.2: Langmuirova izoterma**

Směrnice tečny v počátku je rovna  $K_L \cdot s^{\max}$  (na obrázku šrafovaně). Maximální sorbovaná koncentrace je na obrázku označena plnou čarou, izoterma čarou přerušovanou.

#### 2.4.5 Retardace

Celková hmotnost látky v porézním prostředí je rovna  $\tilde{c} + \tilde{s}$ . Tento výraz dosadíme za koncentraci v advekčně-disperzní rovnici. Dostaneme (v prostředí bez zdrojů):

$$\frac{\partial(\tilde{s} + \tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_c^{ADV} + \vec{u}_c^{DISP}) = 0.$$

Rozepíšeme-li tento vztah a dosadíme-li za  $\tilde{c} = c \cdot n$  a  $\tilde{s} = s \cdot (1 - n)$ , dostaneme:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( s \cdot \frac{1-n}{n} + c \right) + \nabla \cdot (\vec{v} \cdot c) - \nabla \cdot (D_h \vec{\nabla} c) = 0.$$

Použijeme lineární izotermu ( $s = k_D \cdot c$ ), upravíme a dostaneme:

$$\left( k_D \frac{1-n}{n} + 1 \right) \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \cdot c) - \nabla \cdot (D_h \vec{\nabla} c) = 0.$$

$$\left(k_D \frac{1-n}{n} + 1\right) = R,$$

kde  $R$  je retardační koeficient (bezrozměrný). Ten vyjadřuje, kolikrát se zpomalí transport vlivem sorpce. Vztah pro výpočet retardace by bylo možno odvodit také pro nelineární sorpci.

#### 2.4.6 Okrajové a počáteční podmínky

Protože je úloha transportu vždy nestacionární (hledaná koncentrace je funkcí času), je třeba nadefinovat počáteční podmínku rozložení koncentrace v čase  $t=0$ . Dále je třeba zadat okrajové podmínky. Ty jsou stejně jako v případě proudění trojího druhu:

1. Dirichletova okrajová podmínka – její pomocí se zadává koncentrace na části hranice  $\Gamma_D^T$ , kde dochází ke kontaktu s dobře míchaným roztokem o stálé koncentraci  $c_D$ . Zadává se ve tvaru:

$$c = c_D.$$

2. Neumannova okrajová podmínka – její pomocí se zadává derivace neznámé koncentrace na části hranice  $\Gamma_N^T$ . V úloze transportu je tok definován jako:

$$\vec{u}_c = -\vec{v} \cdot c + D_h \cdot \vec{\nabla} c.$$

V tomto výrazu se vyskytuje jak hledaná koncentrace, tak její derivace, okrajová podmínka se tedy omezuje pouze na jeho disperzní část. Na části hranice  $\Gamma_T^T$  pak okrajovou podmínku zadáváme ve tvaru:

$$u_c^{DISP} = (D_h \cdot \vec{\nabla} c) \cdot \vec{n}.$$

Homogenní Neumannova podmínka (nulový tok) se předepisuje například na nepropustné hranici nebo na odtoku z oblasti, kdy se předpokládá, že koncentrace za hranicí je přibližně stejná.

3. Newtonova (Cauchyho) okrajová podmínka – je obecně formulovaná podmínka předepsaného toku koncentrace na části hranice  $\Gamma_T^T$ . Zadáváme ji ve tvaru:

$$u_c = (-\vec{v} \cdot \vec{c} + D_h \cdot \vec{\nabla} c) \cdot \vec{n}.$$

Tuto podmínku používáme tehdy, když není možno použít okrajovou podmínku Dirichletovu ani Neumannovu.

### 3. Simulační software

Touto kapitolou popíšeme software použitý v této práci. Výpočty proudění a transportu byly realizovány v programu Flow123D, což je program napsaný v C++. Ten pro výpočet proudění používá smíšenou hybridní metodu konečných prvků (SH-MKP). Transport je řešen metodou rozkladu operátoru, konvekce je řešena metodou konečných objemů (MKO) a sorpce je počítána numericky. Pro řešení generované soustavy lineárních algebraických rovnic používá program Flow123D externí řešiče jako je Matlab, PETSC nebo GM6.

#### 3.1 Vstupní soubory

Flow123D vyžaduje ke svému běhu hned několik vstupních souborů, které teď ve zkratce popíšeme.

V první řadě je to inicializační soubor (flow.ini), který je třeba zadat jako parametr programu při jeho spouštění. Ten mimo jiné obsahuje typ výpočtu, jména vstupních a výstupních souborů modelu, použitý řešič a některé fyzikální konstanty.

Dále je to soubor sítě (\*.msh), ve kterém jsou vypsané souřadnice uzlů a seznam elementů včetně jejich typu. Ten je vytvářen pomocí programu Gmsh, což je třídímní konečně prvkový generátor sítí, který jako vstup užívá soubor geometrie (\*.geo), ve kterém je, jak už název napovídá, popsána geometrie modelované oblasti a také parametr určující vzdálenost jednotlivých uzlů sítě a tím také počet jejích elementů.

Dalším z požadovaných vstupních souborů je pak soubor topologie sítě (\*.ngh). V tomto souboru jsou zaznamenány vzájemné vztahy sousednosti elementů. Soubor topologie sítě je generován ze souboru sítě pomocí programu NGH.exe. Ten je třeba spouštět s inicializačním souborem NGH.ini, který obsahuje především názvy vstupních a výstupních souborů.

Soubor materiálů (\*.mtr) zaznamenává hodnoty hydraulické vodivosti jednotlivých částí sítě, koeficienty storativity pro případ neustáleného proudění, hodnoty pórovitosti a další údaje popisující fyzikální vlastnosti prostředí.

Posledním z nutných vstupů je soubor popisující okrajové podmínky proudění (\*.fbc).

Flow123D přijímá ještě tři další vstupní soubory, které však ke svému běhu nevyžaduje. Tyto jsou popsány v následujících odstavcích.

Prvním z nich je soubor počátečních podmínek proudění (\*.fic), který je však vyžadován pouze v případě neustáleného proudění. Soubor obsahuje hodnoty tlakového a vektorového pole na jednotlivých elementech v čase  $t = 0$ .

Dalšími dvěma vstupy jsou pak soubor okrajových podmínek transportu (\*.tbc) a soubor počátečních podmínek transportu (\*.tic), které by bylo možno popsat obdobně jako příslušné soubory pro proudění (nezadávají se však tlaky, ale koncentrace jednotlivých transportovaných látek).

Soubory materiálu, okrajových podmínek a počátečních podmínek (a to jak proudění, tak transportu) jsou generovány pomocí programu BCD.exe, který je opět třeba spouštět s inicializačním souborem (BCD.ini). Ten obsahuje především názvy vstupních a výstupních souborů a předpisy a typy okrajových a počátečních podmínek.

### **3.2 Výstupní soubory**

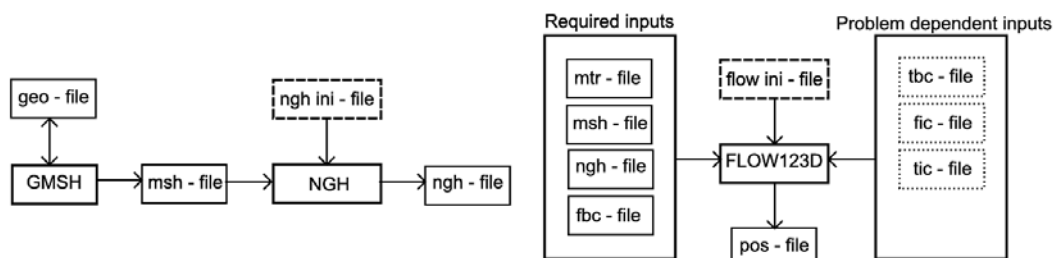
Výsledkem výpočtu matice lineárních algebraických rovnic jsou hodnoty tlakových výšek na elementech a na stěnách sítě, hodnoty piezometrické výšky a přetoky přes jednotlivé stěny sítě ve směru vnější normály. V případě transportu jsou to pak koncentrace na jednotlivých elementech v příslušném čase. Program Flow123D umožňuje generování dvou různých typů výstupních souborů, přičemž oba dva jsou ukládány s příponou POS a lze je zobrazit ve výše zmiňovaném programu Gmsh:

- 1) Výpis výsledků ve formátu ASCII (American Standard Code for Information Interchange). Výsledky uložené v tomto formátu mají tu výhodu, že se v nich uživatel může snadno orientovat, zabírají však relativně hodně místa a déle se otvírají při zobrazení v Gmsh.

- 2) Výpis výsledků ve formátu BIN (binary). To jsou výsledky v takovém tvaru, v jakém je spočetl řešič. Tento formát je vhodný pro další numerické zpracování

a rovněž pro generování souboru počátečních podmínek následného výpočtu neustáleného proudění.

Všechny vstupy a výstupy programu Flow123D a jejich vztahy přehledně znázorňuje Obrázek 3.1 (obrázek převzat z [14]).



**Obrázek 3.1: Vstupy a výstupy programu Flow123D**



#### 4. Simulace kolony

Prvním krokem při vytváření této práce bylo ověřit si možnosti simulačního software při modelování kolonového experimentu popsaného v [9].

Kolonový experiment slouží k simulaci transportu horninou a geochemických dějů probíhajících v různých prostředích. Kolona se naplní horninou, kterou chceme testovat, a vtlačí se do ní roztok zvolených látek. Na výstupu kolony můžeme měřit charakteristiky vystupujícího roztoku (pH, vodivost,...).

Kolona popsaná v [9] je válcového tvaru s podstavou o poloměru  $3,5\text{ cm}$  a o výšce  $30\text{ cm}$ . Kolona byla naplněna zeminou, jejíž koeficient hydraulické vodivosti je roven  $1,6 \times 10^{-3}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  a jejíž porozita je rovna  $0,22$ . Do kolony byl vtlačén roztok nanoželeza o koncentraci  $0,3\text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$  po dobu 502 minut. Tato kolona byla sestavena pro získání experimentálních dat, která měla posloužit k vytvoření jednoduchého modelu migrace nanočástic horninovým prostředím lokality Piešťany.

V programu Gmsh jsem vytvořil a vysíťoval požadovanou geometrii. Pro model jsem zvolil dvě okrajové podmínky pro proudění:

- 1) Dirichletova okrajová podmínka konstantního tlaku na horní podstavě válce. Konstantní tlak nastaven na hodnotu tlaku atmosférického ( $10300\text{ Pa}$ ).
- 2) Neumannova okrajová podmínka určující hodnotu průtoku okrajem modelu na dolní podstavě válce. Průtok nastaven na experimentálně zjištěnou hodnotu převzatou z [9] ( $70,1\text{ ml}\cdot\text{min}^{-1}$ ).

Dále jsem v modelu nastavil okrajovou podmínku pro transport a sice Dirichletovu OKP konstantní koncentrace na dolní podstavě válce ( $0,3\text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$ ). Počáteční podmínkou pro transport byla nulová koncentrace v celém objemu modelu.

Na takto vytvořeném modelu jsem následně spustil simulaci transportu. V modelu je počítáno pouze s nejhrubší frakcí nanoželeza, neboť reprezentuje přibližně 85 procent vstupní koncentrace a zároveň je dobře viditelná na výstupu

experimentu. Retardace byla v modelu reprezentována lineární sorpcí s distribučním koeficientem rovným  $35 \text{ cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$  a s objemovou hmotností rovnou  $1,562 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  (hodnoty převzaty z [9]). Takto zadaná retardace se dá spočítat podle následujícího vztahu:

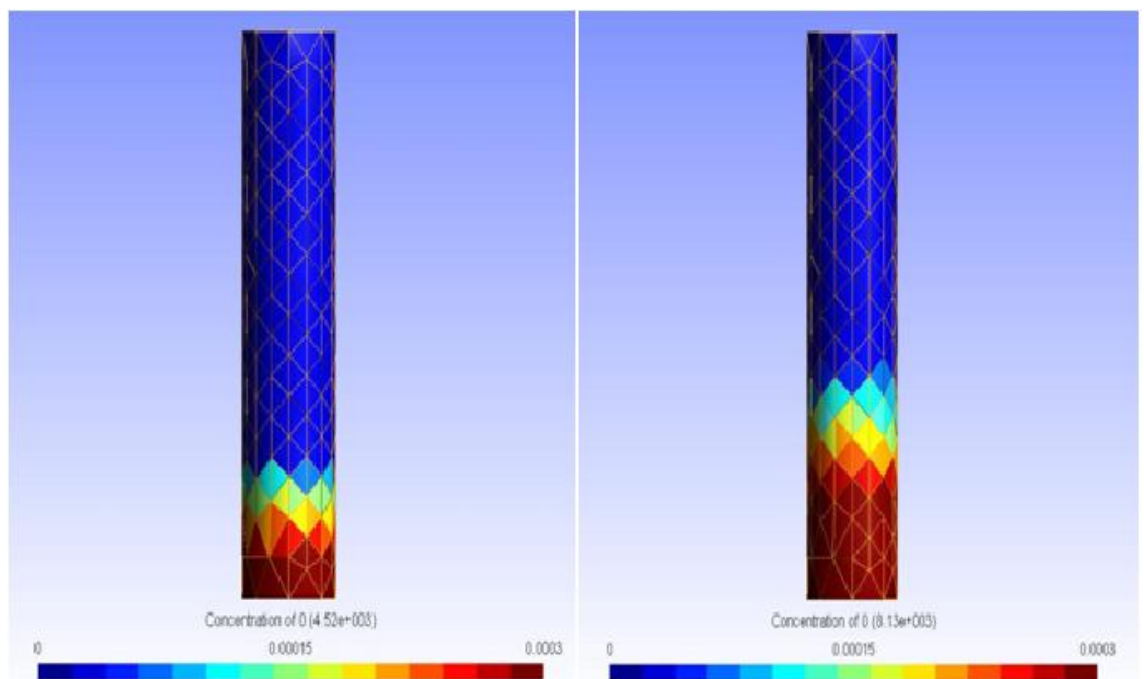
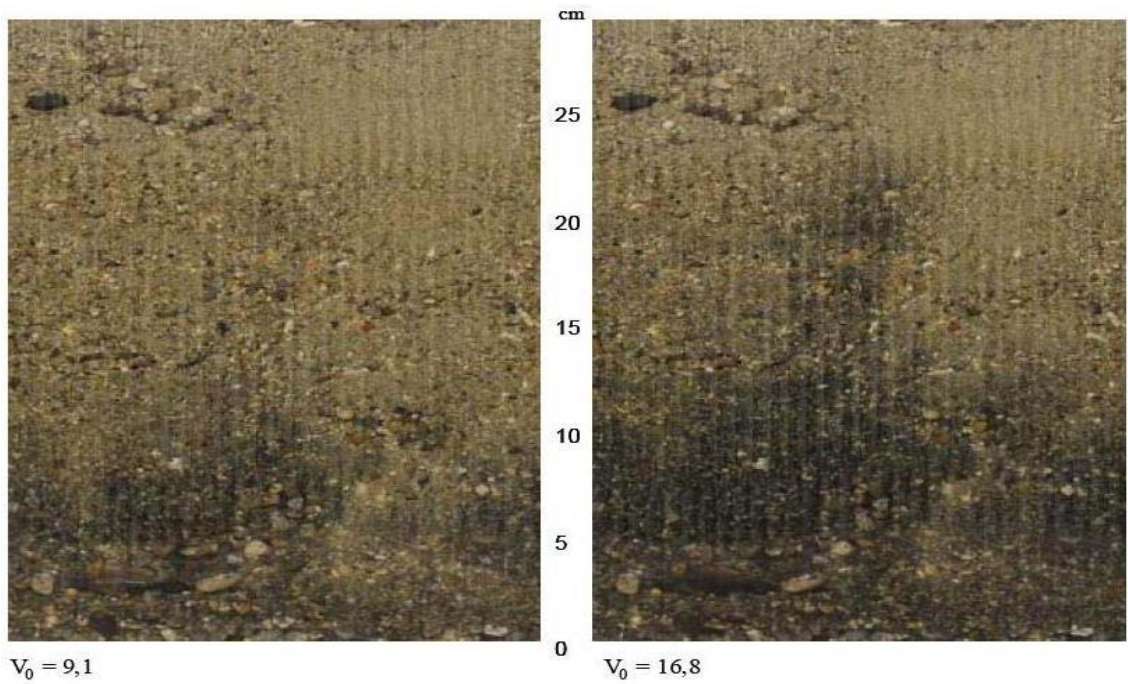
$$R = 1 + \rho \cdot K_D \cdot \frac{1-n}{n},$$

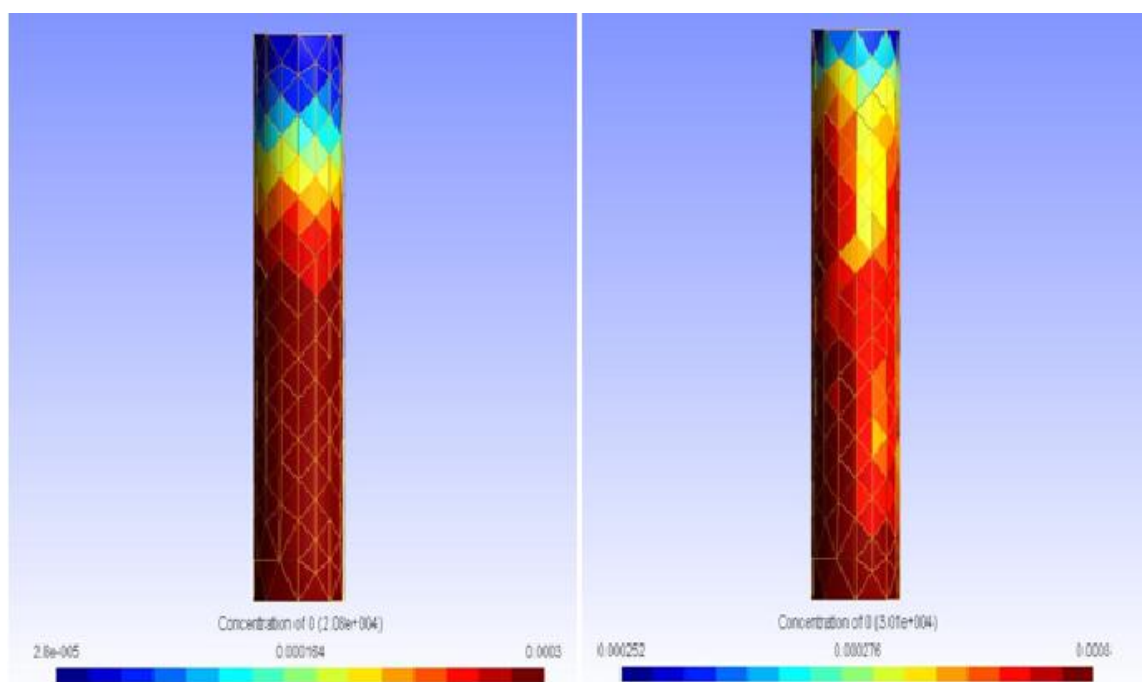
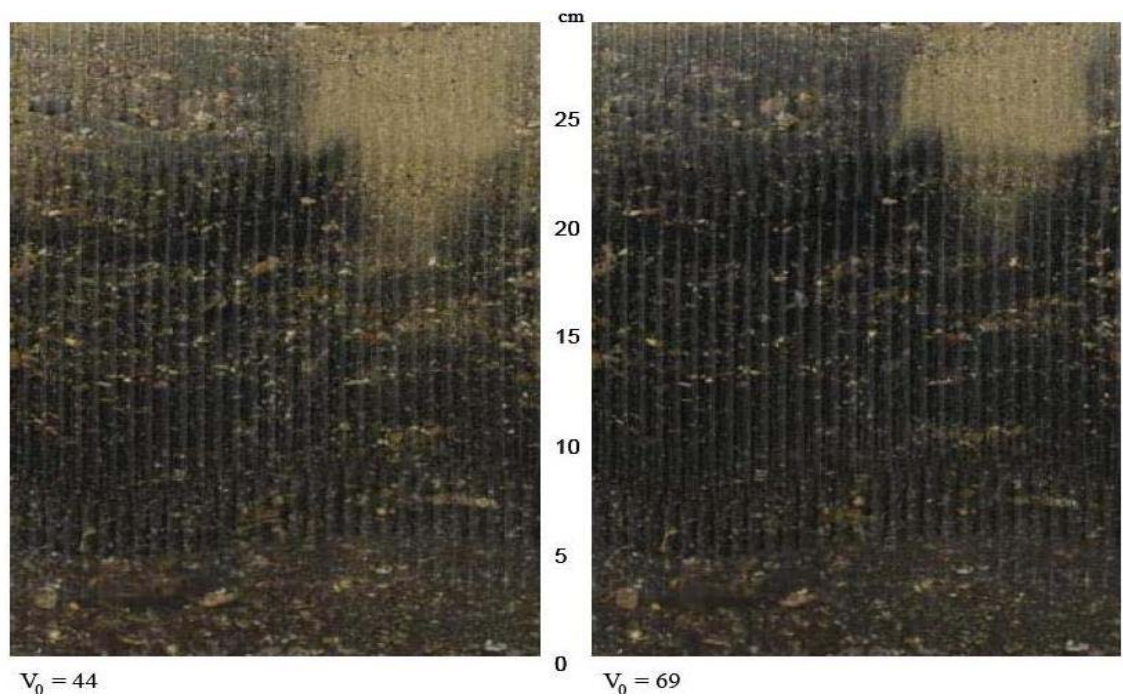
kde  $\rho$  je objemová hmotnost porézního prostředí,  $K_D$  je distribuční koeficient a  $n$  je porozita.

Na Obrázku 4.1 jsou porovnány výstupy modelu s výstupy experimentu.

Pod fotografií experimentu je vždy výstup modelu v odpovídajícím čase. Jednotlivé výstupy modelu mají různé měřítko koncentrací. Hodnoty  $V_0$  u výstupů experimentu značí množství vtlačeného roztoku vyjádřené jako násobek pórového objemu. Pórový objem udává objem volných pórů. Jeho jednotkou je  $\text{m}^3$ . V našem případě je užit ve smyslu časovém jako čas, za který kolonou proteče určitý násobek pórového objemu.

Výstupy modelu jsou v dobré shodě s experimenty. Z toho ovšem nelze vyvozovat, že by byl program Flow123D obecně vhodný pro simulaci jakékoli úlohy šíření železných nanočástic. Transport látky je totiž, jak bylo popsáno v předminulé kapitole, způsobován advekcí a disperzí. Flow123D však disperzi explicitně nepočítá. Výsledky simulací v něm provedených by tedy měly být tím lepší, čím vyšší je Pécletovo číslo (udává poměr advekce a disperze). Nehomogenity na posledním obrázku jsou pravděpodobně způsobeny nepravidelností výpočetní sítě.





**Obrázek 4.1: Srovnání výstupů modelu a experimentu**

## 5. Lokalita Kuřívody

Cílem této práce bylo vyzkoušet výpočetní možnosti programu Flow123D na reálné lokalitě. Kritérii pro výběr lokality byly zajímavá hydrogeologická stavba (průlinovo-puklinové proudění) a dobrá zdokumentovanost (aby bylo z čeho model postavit a s čím srovnat jeho výstupy). Obě tyto podmínky splnila lokalita Kuřívody. Obec Kuřívody (správní obec Ralsko, okres Česká Lípa, Liberecký kraj) se nachází asi 8 km jihovýchodně od města Mimoň. Oblastí, na kterou se bude soustředit náš zájem, je především okolí bývalé vojenské prádelny sovětské armády (ta vojenský prostor využívala v letech 1968 až 1991). Ihned po jejím odchodu se započalo s odstraňováním starých ekologických zátěží. V první řadě došlo k odtěžení znečištěných zemín. Následovalo čerpání a dekontaminace podzemních vod. Znečištění na bázi ropných látek neproniklo ve větší míře do hlubších horizontů a podařilo se ho odstranit. Především v okolí bývalé prádelny je však závažná masivní kontaminace podzemních vod chlorovanými uhlovodíky (trichlorethylen, tetrachlorethylen, tetrachlormethan, chloroform, dichlormethan). Jedná se o zdraví nebezpečné látky, které postihují centrální nervovou soustavu (excitace, dezorientace, opilstost, závratě, ospalost, bezvědomí), poškozují játra (hepatotoxicita), ledviny (nefrotoxicita) a plíce (plicní edém). Je tedy pochopitelné, že nejvyšší prioritou sanačních prací je zamezit průniku těchto látek do zdrojů pitné vody. V roce 2003 byla na základě výběrového řízení vybrána Ministerstvem životního prostředí České republiky společnost Aquatest a.s. k pokračování a dokončení nápravných opatření při řešení ekologických škod na bývalé základně Kuřívody. Ta nám na podzim roku 2009 předala pro účely vytvoření modelu pro tuto diplomovou práci dokumentaci k této oblasti. Sanační práce na lokalitě v současnosti stále ještě probíhají a to metodou chemické oxidace a redukce. Jedná se o zasakování oxidačních nebo redukčních činidel do horninového prostředí. K oxidaci, případně redukci dochází přímo v horninovém prostředí a odpadá tedy čerpání kontaminované vody. V Kuřívodích byly k tomuto účelu použity manganistan draselný ( $\text{KMnO}_4$ ), kyselina 2-hydroxypropanová (triviálně kyselina mléčná,  $\text{CH}_3\text{-CHOH-COOH}$ ) a nanoželezo ( $\text{nanoFe}^0$ ).

## 5.1 Měření

Na lokalitě byla firmou Aquatest a.s. provedena měření za účelem upřesnění geologických a hydrogeologických podmínek. Tato měření nyní stručně popíšeme, v dalším textu se pak už jen budeme odvolávat na jejich výsledky.

Povrchová geofyzika – její pomocí se zjišťují fyzikální vlastnosti horninového prostředí (elektrické, magnetické, seismoakustické, ...). Cílem je vymezit kvazihomogenní celky s přibližně stejnými geofyzikálními vlastnostmi. Povrchová geoelektrika poukazuje na pásma tektonického rozpukání v místech s nižšími hodnotami měrných odporů [1].

Metoda Molekulární formy prvků (MFP) – jedná se o atmogeochemické měření (vzorkuje půdní vzduch). Její podstatou je záchyt molekulární formy prvků v atmosférickém vzduchu, emitovaných geologickými strukturami, sorbentem [8]. Tohoto lze využít například při vyhledávání zlomů. Maximální koncentrační hodnoty MFP jsou tím vyšší, čím výrazněji jsou definovány styky jednotlivých nehomogenit.

Karotážní měření – jedná se o hlubinný geofyzikální průzkum. Užívá se pro určování hranic kolektorů a izolačních vrstev, zjišťování míst přítoků a jejich vydatnosti, směru a rychlosti vertikálního proudění vody a při odběru vzorků vody z libovolné hloubky pod její hladinou. Dále se využívá pro prostorové mapování znečišťujících látek a pro monitorování postupu jejich likvidace in situ [16].

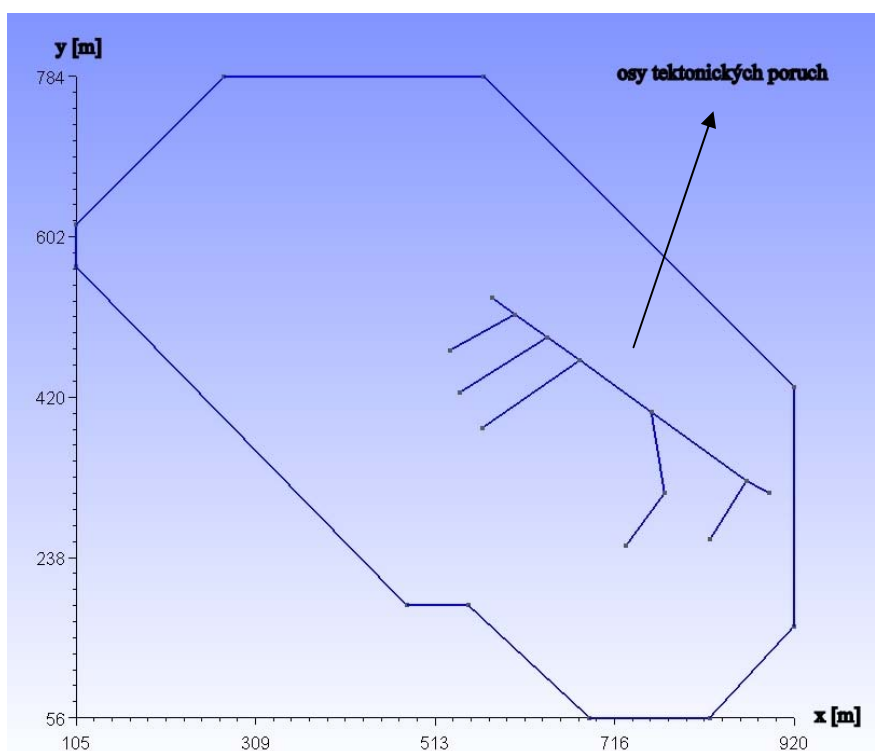
Hydrodynamické zkoušky – jejich cílem je zjistit hydraulické vlastnosti zvodně a podmínky jejího napájení. Na lokalitě Kuřívody byly provedeny krátkodobé hydrodynamické zkoušky metodou tzv. slug-testu. Tato metoda se používá pro rychlé stanovení orientačních hodnot parametrů horninového prostředí v blízkém okolí zkoušeného vrtu [1].

Stopovací zkoušky – spočívají v zasáknutí snadno detekovatelné látky do vrtu a v následném monitoringu její koncentrace v okolí zásaku. Cílem je zjištění (ověření) směru a rychlostí proudění podzemních vod a vzájemné komunikace mezi jednotlivými vrty.

## 5.2 Geometrie modelu

Při sestavování modelu je vždy třeba začít vytvořením geometrie. Nejprve zavedeme souřadné osy. Osa  $x$  povede ze západu na východ, osa  $y$  z jihu na sever a osa  $z$  bude na obě předchozí kolmá a budeme na ni vynášet nadmořskou výšku. Modelováno je území o rozloze 815 x 728 metrů (nejedná se ovšem o obdélník, ale o desetiúhelník). Vymezení modelované plochy je dáno množstvím dostupných informací z vrtných, geofyzikálních, karotážních a jiných průzkumných prací.

Na základě povrchové geoelektriky a metody MFP byly v zájmové oblasti identifikovány tektonická linie (puklina) ve směru SZ-JV a dílčí tektonické linie ve směru SV-JZ. Horizontální řez modelovanou oblastí s vyznačenými osami tektonických poruch je znázorněn na Obrázku 5.1.



**Obrázek 5.1: Horizontální řez modelovanou oblastí**

Průběh tektonických poruch byl zjišťován pouze v okolí kontaminované oblasti a jen tam je s nimi také počítáno. Pukliny se pravděpodobně vyskytují i v jiných částech modelované oblasti, bez dalších měření však není možno zjistit kde.

Na základě karotážních měření, hydrodynamických a stopovacích zkoušek byl sestaven hydrogeologický koncepční model zájmového území [1]. Ten

zjednodušuje mnohvrstevný kolektorový systém na tři mělké zvodněné systémy a jeden regionální turonský kolektor v jejich podloží. Tyto jsou od sebe odděleny izolátory a vzájemně mezi sebou komunikují pouze omezeně, především pomocí puklin a špatně vestrojených vrtů. Mělké zvodněné systémy nazveme po řadě se stoupající hloubkou A, B a C, regionální kolektor nazveme R a izolátory I1, I2 a I3. V Tabulce 1 je uveden stručný popis jednotlivých kolektorů.

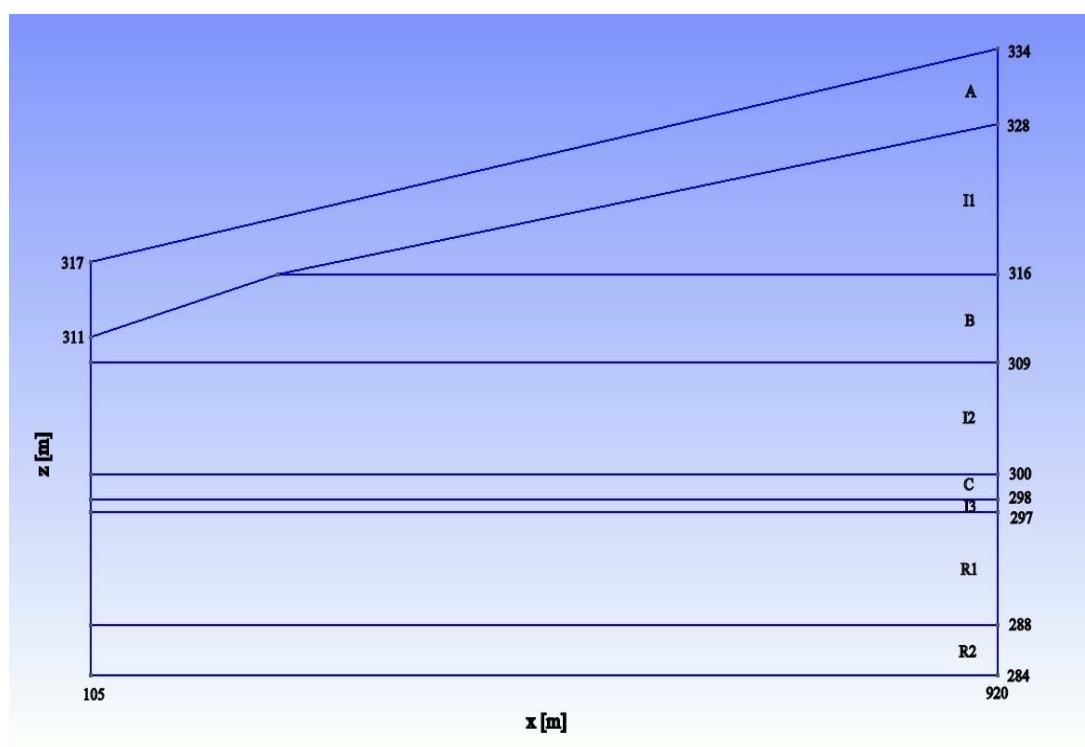
Název kolektoru	Popis
A	Přípovrchový kolektor s volnou hladinou v nadmořské výšce 311 až 334 <i>m</i> o mocnosti 6 <i>m</i> . Jeho báze (dno) je rovnoběžná s povrchem terénu. Směr proudění podzemní vody byl zjištěn od jihovýchodu k severozápadu [1].
B	Kolektor s napjatou hladinou v nadmořské výšce 309 až 316 <i>m</i> . Má horizontální bázi a jeho mocnost se pohybuje v rozmezí 2 až 7 <i>m</i> . Směr proudění podzemní vody zjištěn od jihovýchodu k severozápadu [1].
C	Kolektor s napjatou hladinou v nadmořské výšce 298 až 300 <i>m</i> . Má horizontální bázi a jeho mocnost je 2 <i>m</i> . Směr proudění podzemní vody zjištěn od jihovýchodu k severozápadu [1].
R	Kolektor s volnou hladinou o mocnosti 100 <i>m</i> . Tento kolektor je vodohospodářsky významný a proto představuje ohroženou část horninového prostředí. Pravděpodobně v důsledku čerpání pitné vody je směr proudění opačný než v ostatních kolektorech, tedy od severozápadu k jihovýchodu [1].

**Tabulka 1: Popis kolektorů**

Program Flow123D neumí počítat proudění v nesaturované zóně, počítá ho jako proudění v zóně saturované jen se zápornými tlakovými výškami (a tedy i tlaky). Protože má kolektor R volnou hladinu, docházelo při výpočtu proudového modelu k potížím (výsledky nebyly věrohodné). Tento problém byl vyřešen zadáním



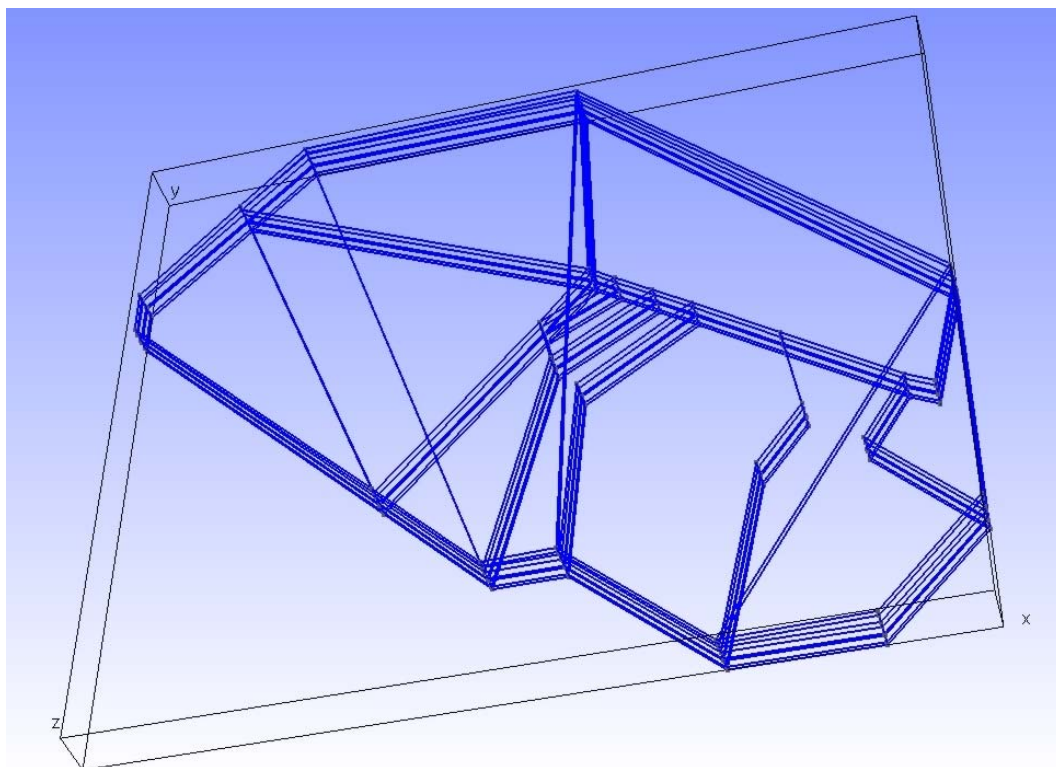
různých OKP pro saturovanou a nesaturovanou zónu kolektoru R. Aby bylo toto oddělení zadání OKP možné, byl kolektor R rozdělen na dva (R1 a R2) už na úrovni geometrie. Kolektor R1 má mocnost 9 m a představuje nesaturovanou část kolektoru R. Kolektor R2 má mocnost 4 m a představuje část saturovanou. Jak patrně, součet mocností kolektorů R1 a R2 (13 m) nesouhlasí s v Tabulce 1 uváděnou mocností kolektoru R (100 m). K této redukci bylo přikročeno z důvodu úspory výpočetního času (sít' je výrazně menší). Na výstup modelu toto zjednodušení nemá žádný patrný vliv. Volnou hladinu má i kolektor A, ale protože je přípovrchový a nesaturovaná zóna je v něm výrazně menší než u kolektoru R, nezpůsobuje to v modelu žádné potíže. Výsledný osmivrstvý koncepční model je znázorněn na Obrázku 5.2.



**Obrázek 5.2: Koncepční model zájmového území (vertikálně převýšeno 10x)**

Pro tvorbu geometrie složitějších vrstev, kdy bylo zapotřebí vzít v potaz i tvar terénu (A a B), jsem měl k dispozici mapy vrstevnic (vytvořené firmou Aquatest) pro dna a stropy těchto vrstev.

Geometrie byla vytvořena v programu Gmsh. Puklina je zakomponována až od vrstvy B níž, protože vrstva A je tvořena hlínou, pískem a rozvětraným pískovcem a pukliny v ní tedy neočekávám. Geometrie je znázorněna na Obrázku 5.3 a popsána v Tabulce 2.

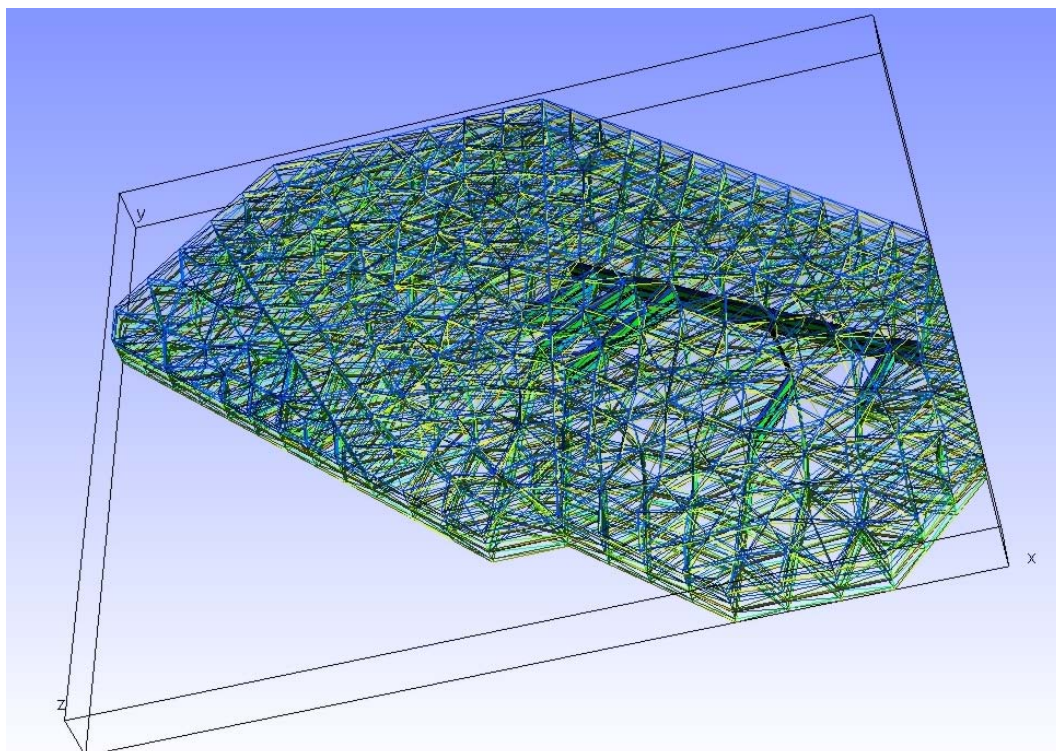


**Obrázek 5.3: Geometrie modelované oblasti**

Počet bodů	195
Počet linií	443
Počet povrchů	321
Počet objemů	72
Počet fyzických skupin	14

**Tabulka 2: Parametry geometrie**

V programu Gmsh byla následně vygenerována síť. Ta je znázorněna (se zvýrazněnými 2D elementy ~ puklinou) na Obrázku 5.4. Síť má 2305 uzlů a 11217 elementů, z toho 240 2D elementů (trojúhelníky) a 10977 3D elementů (čtyřstěny).



**Obrázek 5.4: Sít' modelované oblasti**

### 5.3 Proudový model

Tento pododdíl se zabývá sestavením a kalibrací modelu proudění podzemní vody. V Tabulce 3 jsou uvedeny jednotky, se kterými se při tvorbě modelu počítalo.

Veličina	Jednotka
délka	metr
čas	den
hmotnost	gram

**Tabulka 3: Jednotky použité v modelu**

#### 5.3.1 Okrajové a počáteční podmínky

K popisu okrajových podmínek podzemního proudění byly použity Dirichletovy a Neumannovy OKP. Tyto jsou shrnuty v Tabulce 4.

Hranice modelu	Typ OKP
Hrany vrstvy A	Dirichletova
Hrany vrstvy I1	Homogenní Neumannova
Hrany vrstvy B	Dirichletova
Hrany vrstvy I2	Homogenní Neumannova
Hrany vrstvy C	Dirichletova
Hrany vrstvy I3	Homogenní Neumannova
Hrany vrstvy R1	Homogenní Neumannova
Hrany vrstvy R2	Dirichletova
Dolní podstava modelu	Homogenní Neumannova
Horní podstava modelu	Neumannova

**Tabulka 4: Okrajové podmínky proudění**

Každá z vrstev má deset hran a na každé z nich je z důvodu co nejvyšší přesnosti nadefinována jiná OKP. Hodnoty Dirichletových OKP byly čerpány z map hydroizohyps (vypracovaných firmou Aquatest). Hydroizohypsa je pomyslná čára (izolinie) označující na mapě stejnou výšku podzemní vody. Neumannova OKP na myšlené horní podstavě modelu představuje srážky. Průměrný roční úhrn srážek v oblasti kolísá mezi 680 a 750 mm [1]. Je ovšem třeba vzít v potaz, že velká část srážek steče po povrchu nebo se odpaří. Dle Mapy odtoku podzemní vody ČSSR [7] se v zájmové oblasti vsákne přibližně 15% srážek. Z tohoto dostaneme výslednou hodnotu Neumannovy OKP  $-2,875 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{den}^{-1}$ . Znaménko mínus vyjadřuje, že voda ze srážek do oblasti vtéká (tok proti směru jednotkové vnější normály).

Modelujeme ustálené proudění, počáteční podmínky tedy předepisovat nemusíme.

### 5.3.2 Parametry proudového modelu a jejich kalibrace

Pro vytvoření proudového modelu bylo třeba zadat hodnoty porozity, hydraulické vodivosti pro každou z vrstev a hydraulické vodivosti pukliny. Hodnota žádného z těchto parametrů mi nebyla před zahájením kalibrace známa. Měl jsem k dispozici jen odhady hydraulických vodivostí vrstev A, B, C a R získané z provedených čerpacích zkoušek.

Kalibrace modelu je založena na změně vstupních parametrů tak, aby bylo dosaženo co největší shody mezi úrovněmi hladin vypočtenými modelem a naměřenými. Tohoto jsem se nejprve snažil docílit vizuálním srovnáním výstupů modelu s mapami hydroizohyps. Tento přístup se však ukázal být neefektivním a nepřesným. Bylo tedy rozhodnuto využít pro kalibraci software UCODE. Jedná se o program vyvinutý primárně pro kalibraci modelů sestavených v programu Modflow. Lze ho však použít s každým programem, který má číselné (ASCII nebo textové) vstupy a výstupy. UCODE byl vytvořen aby:

1. Upravoval vstupy modelu a načítal hodnoty z jeho výstupů.
2. Porovnával uživatelem poskytnutá pozorování s příslušnými hodnotami načtenými z výstupu modelu.
3. Používal modifikovanou Gauss-Newtonovu metodu k iterační úpravě uživatelem zvolených vstupních parametrů tak, aby byla minimalizována hodnota účelové funkce (bezrozměrná). Ta je získána součtem čtverců reziduí (rozdíl mezi pozorovanou a simulovanou hodnotou) vynásobených váhami jednotlivých pozorování:

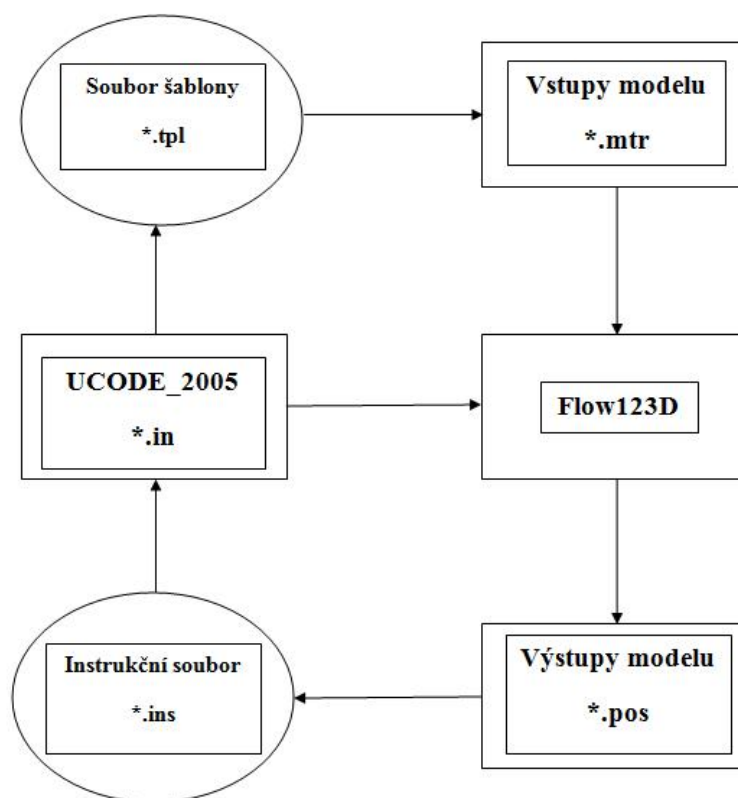
$$S(b) = \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot (h_i - h_i'(b))^2,$$

kde  $\omega_i$  je váha i-tého pozorování,  $n$  je počet pozorování,  $h_i$  je jeho naměřená hodnota a  $h_i'(b)$  je jeho simulovaná hodnota (se sadou parametrů  $b$ ).

4. Vypsal výsledné hodnoty parametrů.

5. Vypočetl a vypsal statistiky, které slouží k identifikaci parametrů, které nemohou být odhadnuty, ke zhodnocení odhadnutých parametrů a zhodnocení toho, jak přesně model reprezentuje skutečnost.

Na Obrázku 5.5 je znázorněno schéma propojení programu UCODE s programem Flow123D.



**Obrázek 5.5: Schéma propojení UCODE s Flow123D**

Hlavní vstupní soubor programu UCODE (\*.in) obsahuje následující informace:

- název modelu, jednotky v něm používané a příkaz používaný k jeho volání (typicky nějaký batch soubor \*.bat),
- pokyny, má-li UCODE jen spočítat citlivosti parametrů nebo je i optimalizovat,
- pokyny pro Gauss-Newtonovu metodu (maximální počet iterací, konvergenční kritéria, ...),

- tabulku vstupních parametrů modelu, jejich počáteční hodnoty, jejich omezení, ...
- tabulku odvozených parametrů, jejichž hodnoty nepodléhají kalibraci přímo, ale jsou vypočítávány podle uživatelem specifikovaného vztahu z parametrů popsanych v tabulce předchozí,
- tabulku pozorování, jejich hodnoty a váhy,
- odkazy na instrukční soubor a soubor šablony.

Soubor šablony (\*.tpl) je v podstatě soubor materiálů (\*.mtr), který má ale na místě kalibrovaných parametrů místo jejich hodnoty jejich název, pod kterým jsou uvedeny v tabulce parametrů (nebo v tabulce odvozených parametrů) v hlavním vstupním souboru programu UCODE (tento název je vepsán mezi dva vykřičníky).

Instrukční soubor (\*.ins) obsahuje pokyny pro vyhledání výstupů modelu, které přísluší k zadaným pozorováním, ve výstupním souboru programu Flow123D (\*.pos).

Podrobnější popis programu UCODE přesahuje rámec této práce, lze ho však najít například v [11].

Prvním úkolem před zahájením kalibrace bylo vybrat parametry, které budou optimalizovány. Byly vybrány hydraulické propustnosti každé z vrstev a hydraulická vodivost pukliny. Dále byl zaveden předpoklad, že horizontální hydraulická vodivost je desetkrát větší než ta vertikální. Tento předpoklad byl realizován pomocí tabulky odvozených parametrů. Dalšími parametry, které by bylo možno optimalizovat, jsou porozita a množství srážek. Tyto nebyly do kalibrace zahrnuty, protože bylo možno očekávat silnou korelaci mezi nimi a hydraulickými vodivostmi některých vrstev. K optimalizaci bylo tedy určeno celkem osm parametrů.

Dále bylo třeba vytvořit pozorování. V dokumentaci k oblasti (konkrétně v mapách hydroizohyps) jsou zakresleny vrty s vyznačenými hodnotami piezometrické výšky. Z těchto map bylo třeba vyzískat souřadnice vrtů, najít uzel sítě, který je k nim nejbližší (za tímto účelem jsem si napsal aplikaci hledající uzel

sítě, který je k daným souřadnicím nejbližší), a následně vyhledat, kde ve výstupním souboru programu Flow123D (číslo řádku a číslo sloupce) je vypočtená hodnota piezometrické výšky v tomto uzlu zaznamenána, aby bylo možno vytvořit instrukční soubor (\*.ins). Každému pozorování bylo nutno přidělit váhu. Váhy jsou používány, aby zvýhodnily spolehlivá pozorování oproti těm nespolehlivým. Váha se značí  $\omega$  a spočítá se jako:

$$\omega = \frac{1}{\sigma^2},$$

kde  $\sigma^2$  je rozptyl, který je definován jako střední hodnota kvadrátů odchylek od střední hodnoty:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (x_i - E(X))^2,$$

kde  $x_i$  je hodnota veličiny  $X$  a  $E(X)$  je její střední hodnota.

Váhy v podstatě vyjadřují, jak moc nepřesné může dané pozorování být. Čím je váha nižší, tím je pozorování nepřesnější. V našem případě byly nepřesnosti způsobeny jednak vlastním měřením piezometrické výšky ve vrtu a pak také nepřesností určování pozice vrtu v oblasti (nepřesné měření v mapě) a tím, že nejbližší uzel sítě mohl být od změřené polohy vrtu i několik metrů daleko. Tyto faktory ale ovlivňovaly všechna pozorování stejnou měrou a tak byla všem pozorováním přidělena stejná váha ( $0,894 \text{ m}^{-2}$ ).

V Tabulce 5 jsou uvedeny hodnoty všech parametrů výsledného kalibrovaného modelu.



Parametr	Hodnota
Hydraulická vodivost vrstvy A	$0,3260 \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy I1	$1,7 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy B	$0,1714 \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy I2	$7 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy C	$0,1555 \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy I3	$2 \cdot 10^{-7} \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy R1	$0,031 \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost vrstvy R2	$0,031 \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Hydraulická vodivost pukliny	$1 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{den}^{-1}$
Porozita (pro všechny vrstvy stejná)	0,2

**Tabulka 5: Parametry modelu a jejich hodnoty**

Hydraulické vodivosti vrstev A, B, C a R uvedené v Tabulce 5 jsou horizontální. Vertikální jsou desetkrát menší. Hodnoty parametrů jsou fyzikálně reálné, jen hydraulická vodivost vrstvy R vyšla řádově menší, než by bylo možno očekávat. Na tento parametr je však model velmi málo citlivý, hodnotu vzešlou z kalibrace je tedy třeba brát s rezervou.

### 5.3.3 Výstupy modelu a jejich zhodnocení

V Tabulce 6 je srovnání hodnot piezometrické výšky naměřené a simulované v bodech pozorování.

<b>Pozorování</b>	<b>X [m]</b>	<b>Y [m]</b>	<b>Z [m]</b>	<b>Naměřená hodnota [m]</b>	<b>Simulovaná hodnota [m]</b>
A1	206,8	524,1	319,7	319,52	317,687
A2	363	410,1	322,9	318,62	319,937
A3	652	247,7	327,6	328,52	326,567
A4	844,37	349,67	331,49	331,72	331,207
A5	751,27	158,54	328,91	327,76	328,307
B1	556,4	264,4	309	321,78	322,992
B2	758	403	309	327,12	327,513
B3	767	172,1	309	324,48	325,736
B4	698,25	104,75	309	323,81	325,630
B5	312,2	447,75	309	315,34	319,323
C1	566	385	298	320,66	321,134
C2	626,43	271,92	298	321,62	322,028
C3	676,98	407,82	298	321,16	321,383
C4	718,75	202,25	298	322,91	322,640
R1	262,94	451,57	284	288,71	288,111
R2	602,21	324,18	284	288,47	288,184
R3	729	251	284	288,23	288,011

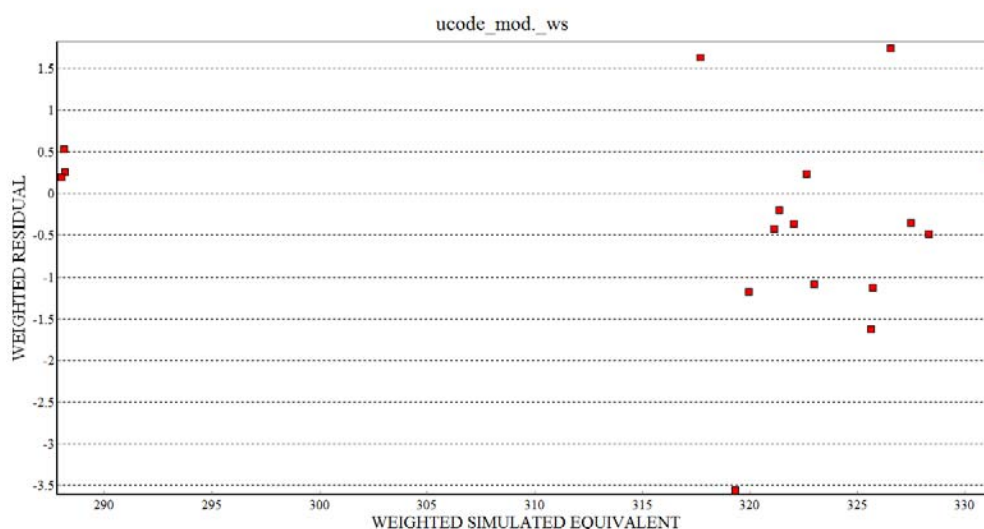
**Tabulka 6: Naměřené a simulované hodnoty piezometrických výšek v bodech pozorování**

Simulované hodnoty jsou v dobré shodě s naměřenými. Hodnota účelové funkce dokonvergovala k hodnotě 26,281, v ideálním případě by však měl být rovna nule. S rostoucím počtem parametrů se rozdíl mezi modelem a pozorováními zmenšuje (účelová funkce klesá), nelze však model zahrnout parametry, které nejsou podpořeny pozorováními. Čím více parametrů kalibrujeme, tím méně spolehlivý je jejich odhad. Tento fakt zohledňuje statistika CEV (rozptyl vypočtené chyby). Označuje se  $\bar{s}^{-2}$ , je bezrozměrná a vypočte se jako:

$$\bar{s}^{-2} = \frac{S(b)}{NO + NPR - NP},$$

kde  $NO$  je počet pozorování,  $NPR$  je počet apriorních informací a  $NP$  je počet parametrů. Odmocnina z CEV se nazývá standardní chyba regrese (STD ERR) a značí se  $\bar{s}$ . Hodnota obou těchto statistik by ideálně měla být rovna jedné. V našem případě je  $\bar{s}^{-2} = 2,6281$  a  $\bar{s} = 1,6211$ . To může znamenat jednu ze dvou věcí: příliš velké váhy pozorování nebo chybu modelu. Ta může být až  $\bar{s}$ -krát větší než chyba měření.

Na Obrázku 5.6 je graf vážených reziduí jednotlivých pozorování.



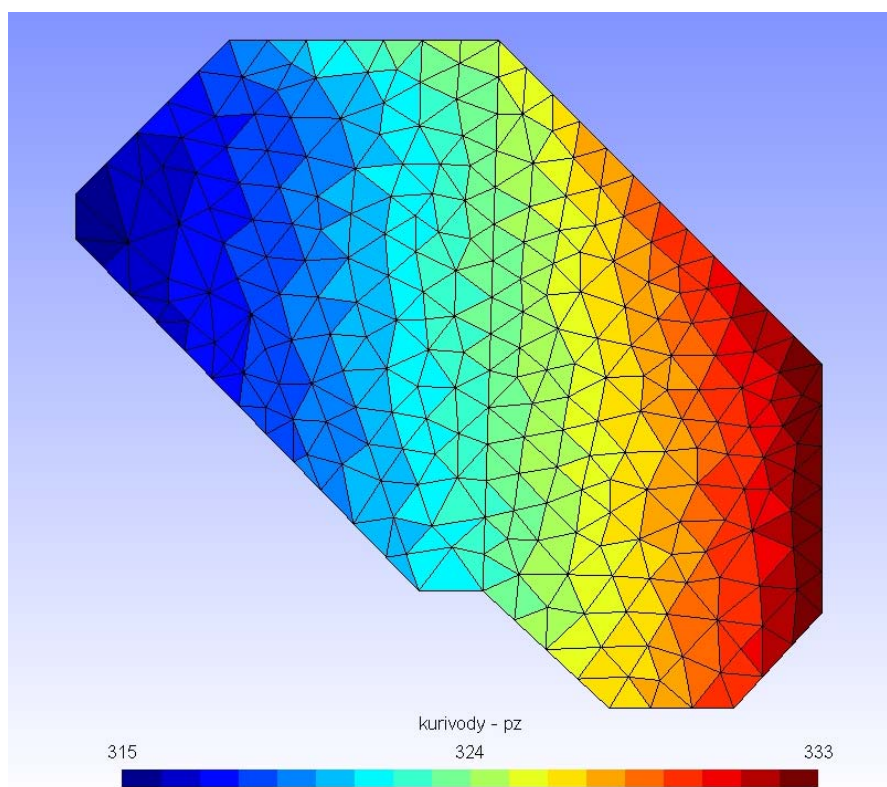
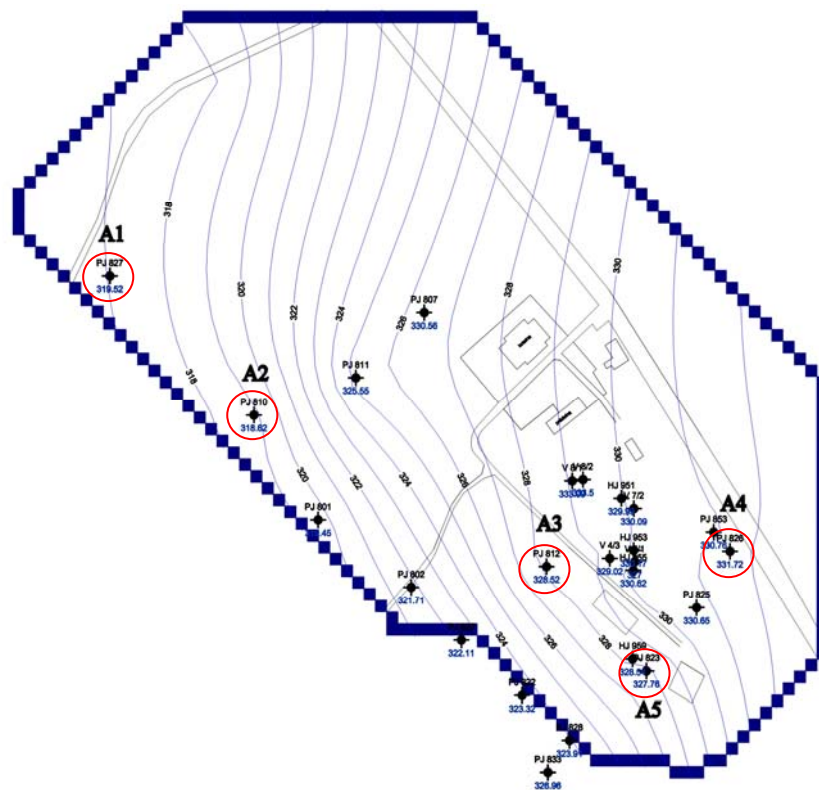
**Obrázek 5.6: Vážená rezidua jednotlivých pozorování**

Hodnoty vážených reziduí by se měly pokud možno co nejvíce blížit nule. Měl by být také vyrovnaný počet hodnot větších než nula a hodnot menších než nula. V našem případě je sedm reziduí větších a deset menších než nula.

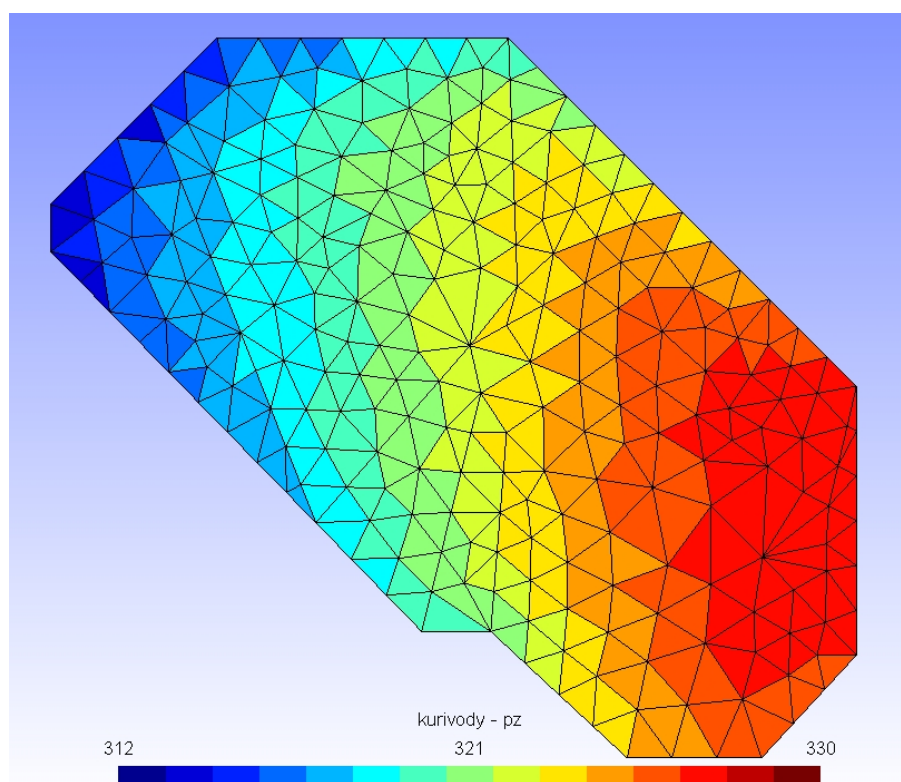
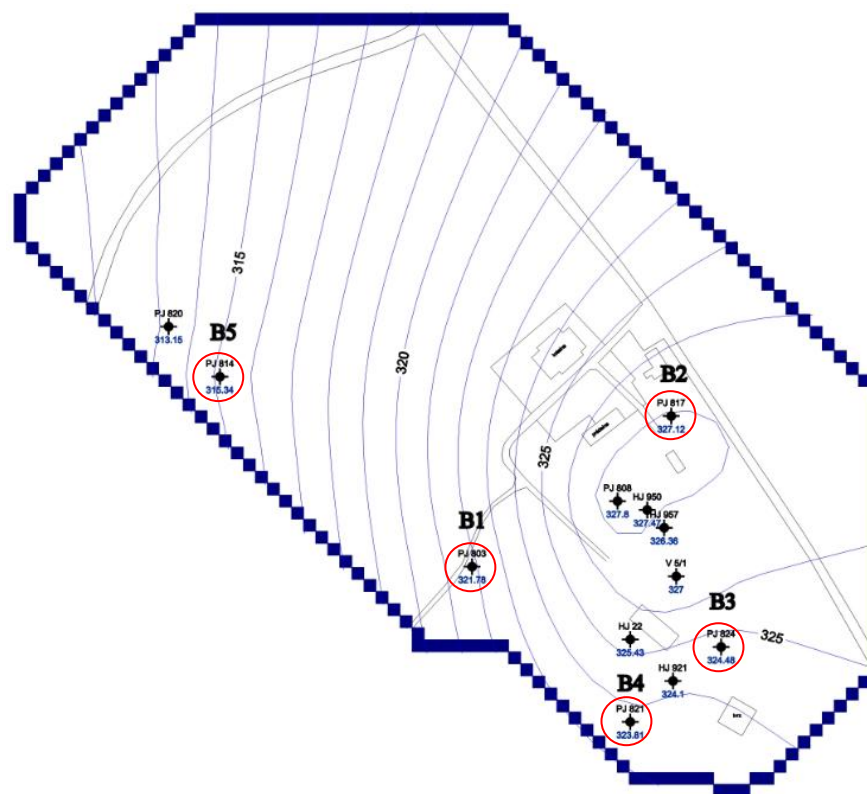
Pro kalibraci nebyla použita všechna dostupná pozorování a to proto, že jejich přidávání je věc poměrně pracná a zabere mnoho času.

Největší odchylky simulovaných hodnot od těch naměřených se vyskytují v západní části kolektoru B tam, kde k němu přímo přiléhá kolektor A (není mezi nimi vrstva izolátoru). Tato nepřesnost modelu je způsobena tím, že hydraulická vodivost každé z vrstev je v celém jejich objemu stejná (vrstvy jsou homogenní). To je ovšem ve skutečnosti dosti málo pravděpodobné. Model by tedy bylo možno vylepšit rozdělením každé z vrstev do několika zón s různou hydraulickou vodivostí. Toto by ale muselo být provedeno už na úrovni geometrie, což se opět z důvodů pracnosti a časové náročnosti nestalo.

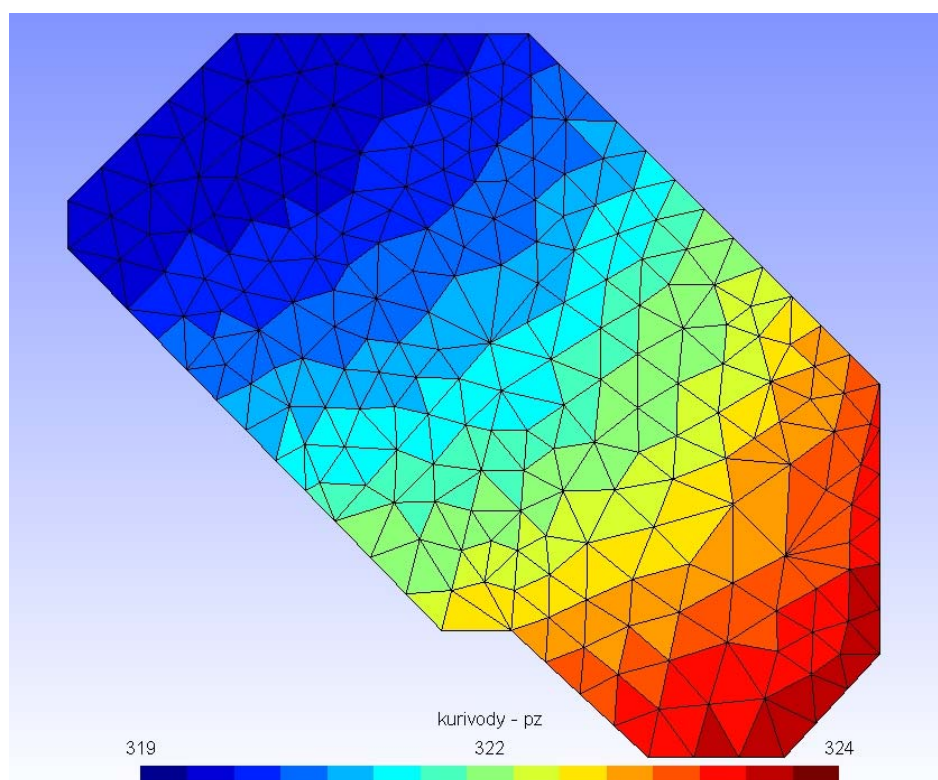
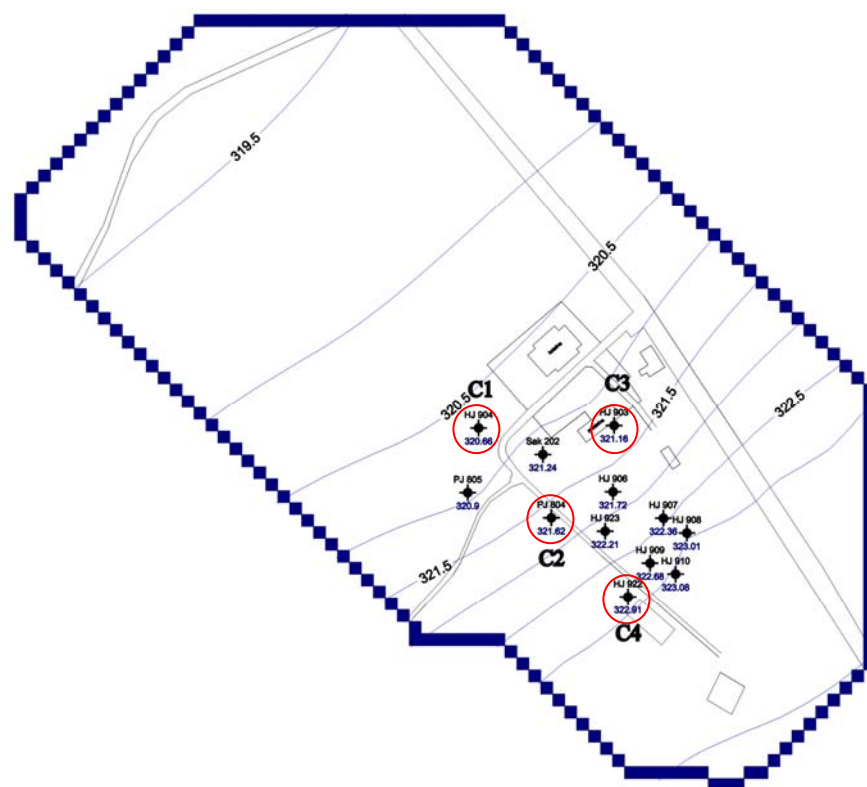
Na Obrázcích 5.7 – 5.10 jsou srovnány mapy hydroizohyps vrstev A, B, C a R (se zvýrazněnými použitými pozorováními) [1] a simulované piezometrické výšky týchž vrstev.



Obrázek 5.7: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy A

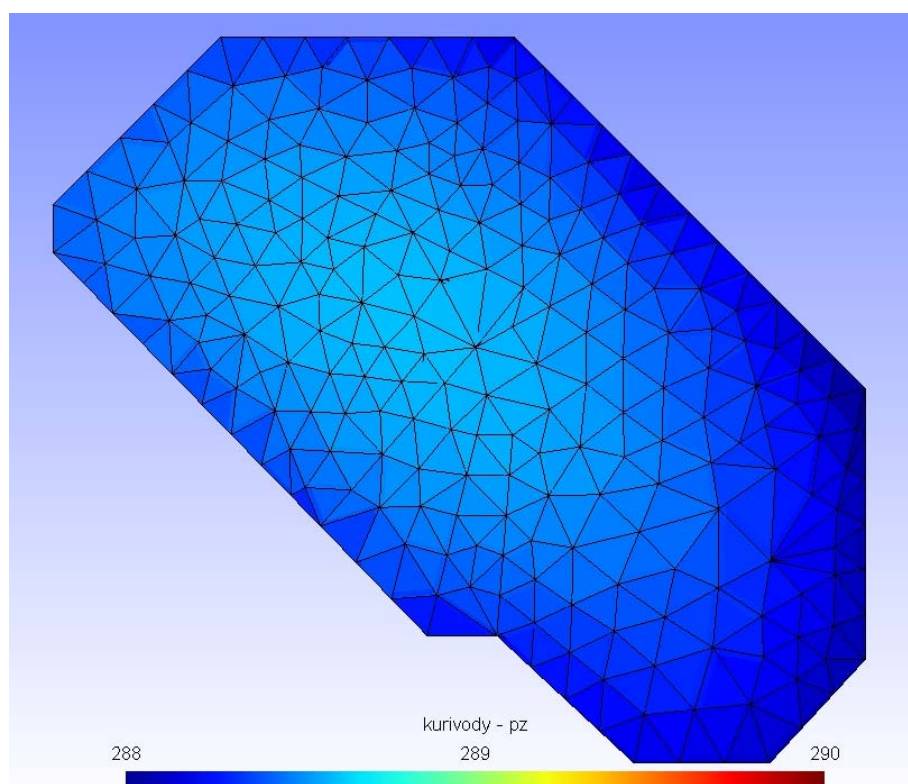
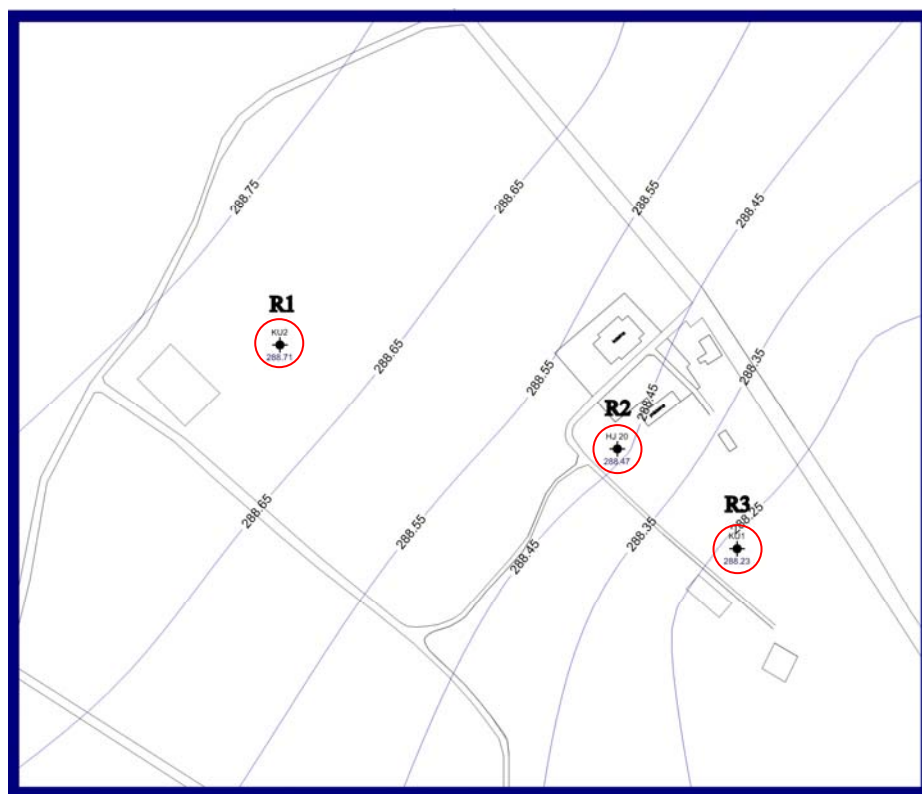


Obrázek 5.8: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy B



Obrázek 5.9: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy C





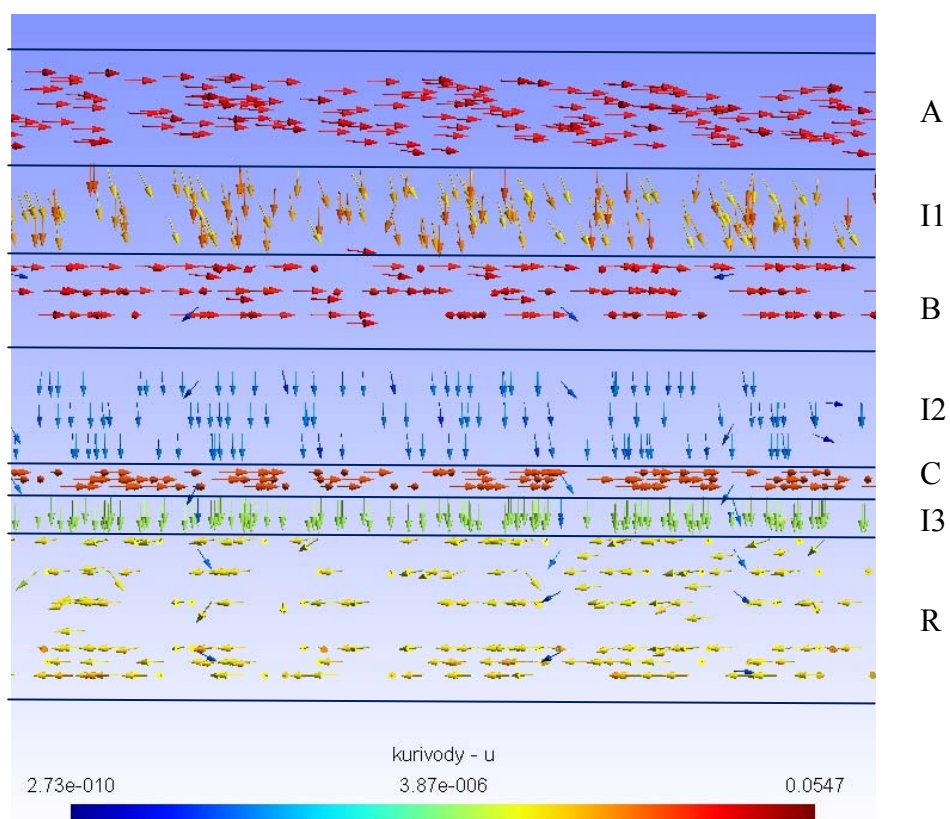
**Obrázek 5.10: Srovnání simulovaných a změřených piezometrických výšek vrstvy R**



Vrstva R je však velmi málo prozkoumaná (jen tři vrty, které jsou navíc téměř na jedné přímce). Její interpretaci jak ve formě hydroizohyps, tak i ve formě výstupu z modelu je třeba brát s poměrně značnou rezervou. Gradient piezometrických výšek ve vrstvě R je navíc tak malý, že je výstup z modelu na první pohled dost nezajímavý. Pro model jsou však daleko důležitější ostatní zvodnělé vrstvy. Nabízí se proto otázka, nebylo-li by bývalo lepší vrstvu R do modelu vůbec nezahrnovat.

Shoda modelovaných piezometrických výšek s mapami hydroizohyps je relativně dobrá. Zlepšení by bylo možno dosáhnout metodami popsanými výše. Uzavřená křivka v mapě hydroizohyps vrstvy B je způsobena interpretací měření vykreslovacím programem (Surfer), nemá žádnou reálnou příčinu a nebylo tedy žádoucí snažit se ji modelově replikovat.

Na Obrázku 5.11 jsou zobrazeny vektory filtrační rychlosti ve vertikálním průřezu oblastí (v zájmu přehlednosti se jedná o pouhý výřez).



**Obrázek 5.11: Vektory filtrační rychlosti ve vertikálním řezu oblastí**

Z Obrázku 5.11 je patrné, že v souladu s předpoklady je směr proudění ve vrstvě R opačný než v ostatních zvodnělých vrstvách.

V Tabulce 7 je uvedena vodní bilance (Water budget) jednotlivých zvodnělých vrstev. Ve Flow123D je toto řešeno pomocí příznaků (tagů) u jednotlivých okrajových podmínek. Lze tedy zjistit jen toky přes hranici a případné přetoky mezi vrstvami je třeba dopočítat ručně.

Hranice modelu	Průtok [ $m^3 \cdot den^{-1}$ ]
Dotace od srážek	-10,7576
Hrany vrstvy A	-164,382
Hrany vrstvy B	175,14
Hrany vrstvy C	-2,47319
Hrany vrstvy R	2,462

**Tabulka 7: Vodní bilance**

Hodnoty se záporným znaménkem označují vtok do oblasti, hodnoty se znaménkem kladným výtok z oblasti. Velikosti průtoků se mohou zdát být značné, je ale třeba vzít v potaz, že modelovaná oblast je poměrně rozsáhlá (její objem je  $3\,183\,420\,m^3$ ). Z tabulky je patrné, že k největšímu přetoku dochází mezi vrstvou A a B. Komunikace mezi ostatními vrstvami je silně omezena nízkou propustností izolátorů I2 a I3.

#### 5.4 Transport kontaminace

Tento pododdíl se zabývá transportem kontaminace v modelované oblasti. Základem pro tvorbu transportního modelu byly mapy kontaminačních mraků pro vrstvy A, B a C vytvořené firmou Aquatest na základě plošného monitoringu podzemních vod. Ty reprezentují stav z doby, kdy byla dokumentace k oblasti vytvořena (2004). Další dostupnou informací bylo předpokládané zbývající množství chlorovaných uhlovodíků v horninovém prostředí. To je dle [1] asi 1350 kg.

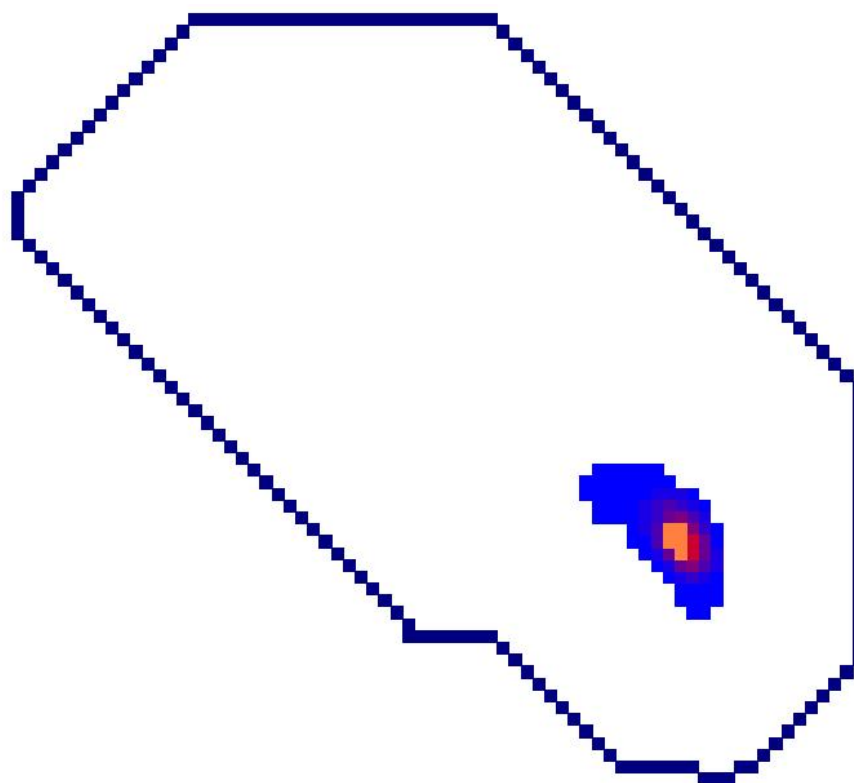
Model transportu vycházel z kalibrovaného modelu proudového. Čas počátku simulace byl stanoven na dobu před 25 lety (od doby vypracování dokumentace k oblasti), kdy pravděpodobně ke vzniku kontaminace došlo. Cílem bylo replikovat současný tvar kontaminačních mraků.

Na elementu označeném jako zdrojový byla nastavena okrajová podmínka konstantní koncentrace a následně byla, prozatím bez retardace, spuštěna simulace. Další postup spočíval v tom, že byla měněna hodnota okrajové podmínky tak, aby celkové množství kontaminace v oblasti bylo rovno množství předpokládanému (1350 kg). Za tímto účelem byl napsán program, který vypočítává úhrnné množství látky v modelované oblasti. Tato rovnost byla splněna při hodnotě okrajové podmínky  $55000 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ .

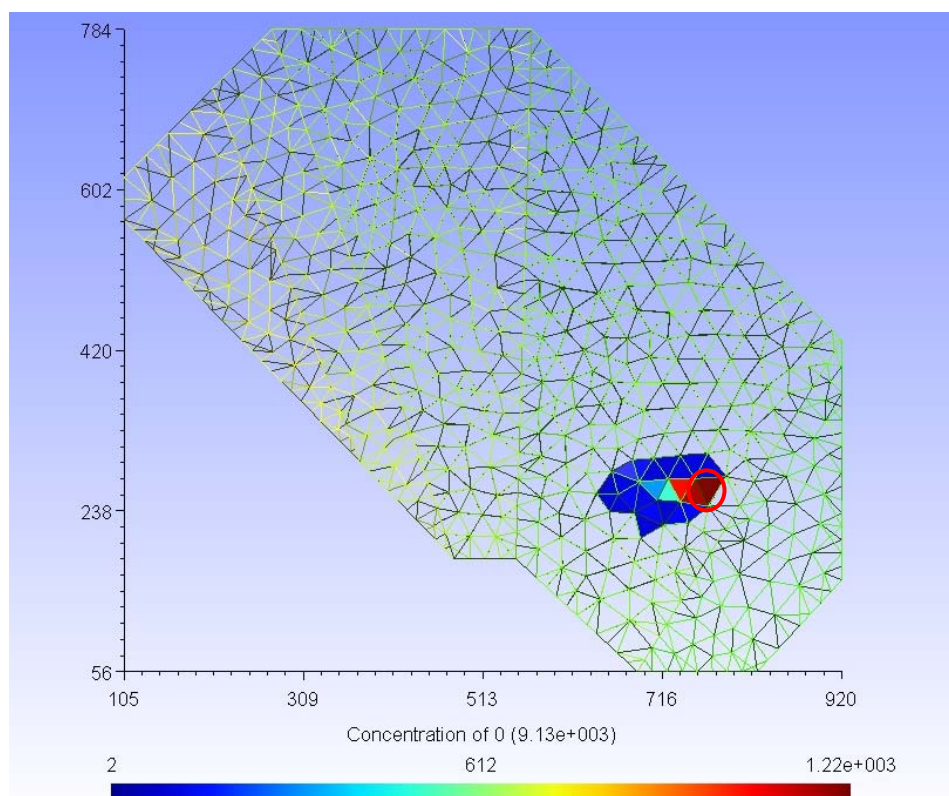
Výsledek simulace je však skutečnému rozložení koncentrací poměrně dost vzdálen. Největším problémem je fakt, že se kontaminace šířila pouze ve vrstvě A a nepronikala do žádné z hlubších vrstev. Toto by se dalo zdůvodnit tím, že kontaminující látka není plně rozpuštěná v podzemní vodě. Reálně se tedy jedná o vícefázové proudění, které ale ve Flow123D modelovat nelze. Chlorované uhlovodíky mají větší hustotu než voda (například tetrachlorethylen má hustotu  $1622 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ) a mohou tedy snadno pronikat do hlubších vrstev. Takovýto průnik mohly usnadnit také špatně vystrojené vrty.

Toto zjištění omezilo mé snahy pouze na pokus replikovat tvar kontaminačního mraku ve vrstvě A. Rychlost šíření kontaminace je možno ovlivňovat různými hodnotami retardačního koeficientu. Retardaci lze ve Flow123D realizovat pomocí sorpce. Já jsem se rozhodl pro sorpci lineární. Nejlepší shody bylo, při zachování jediného zdrojového elementu, dosaženo s bezrozměrným distribučním koeficientem  $k_D = 1,5$ .

Na Obrázku 5.12 je znázorněn kýžený tvar kontaminačního mraku. Obrázek byl vyexportován z modelu oblasti vytvořeného firmou Aquatest v programu Modflow (nikde v dokumentaci k oblasti totiž není znázorněn kontaminační mrak spolu s celou oblastí, vždy se jedná jen o výřez, což by komplikovalo srovnání).



**Obrázek 5.12: Skutečný tvar kontaminačního mraku ve vrstvě A**



**Obrázek 5.13: Simulovaný tvar kontaminačního mraku ve vrstvě A**

Na obrázku 5.13 je pak znázorněn tvar kontaminačního mraku vzešlý ze simulace (zdrojový element je ten v kroužku). Jak vidno, shoda není dobrá. Toto má dvě základní příčiny:

1. Flow123D neumí počítat disperzi. Přítomnost numerické disperze v transportním modelu nemohla tento nedostatek vykompenzovat.
2. Směr proudění v modelu (z východu na západ) je mírně odlišný od toho skutečného (z jihovýchodu na severozápad). Z tohoto důvodu je kontaminační mrak protažen jiným směrem.

Srovnání hodnot koncentrací v jednotlivých mracích by nemělo smysl. Důvodem je jednak značná velikost elementů modelu a pak také fakt, že v modelovaném kontaminačním mraku jediné vrstvy je přítomna veškerá kontaminace z celé oblasti.

### **5.5 Zásak nanoželeza**

V tomto pododdíle bude popsána simulace zásaku nanoželeza do modelované lokality. Zásak byl firmou Aquatest na lokalitě reálně proveden a zdokumentován. Zpráva o něm byla hlavním zdrojem informací pro jeho simulaci [1].

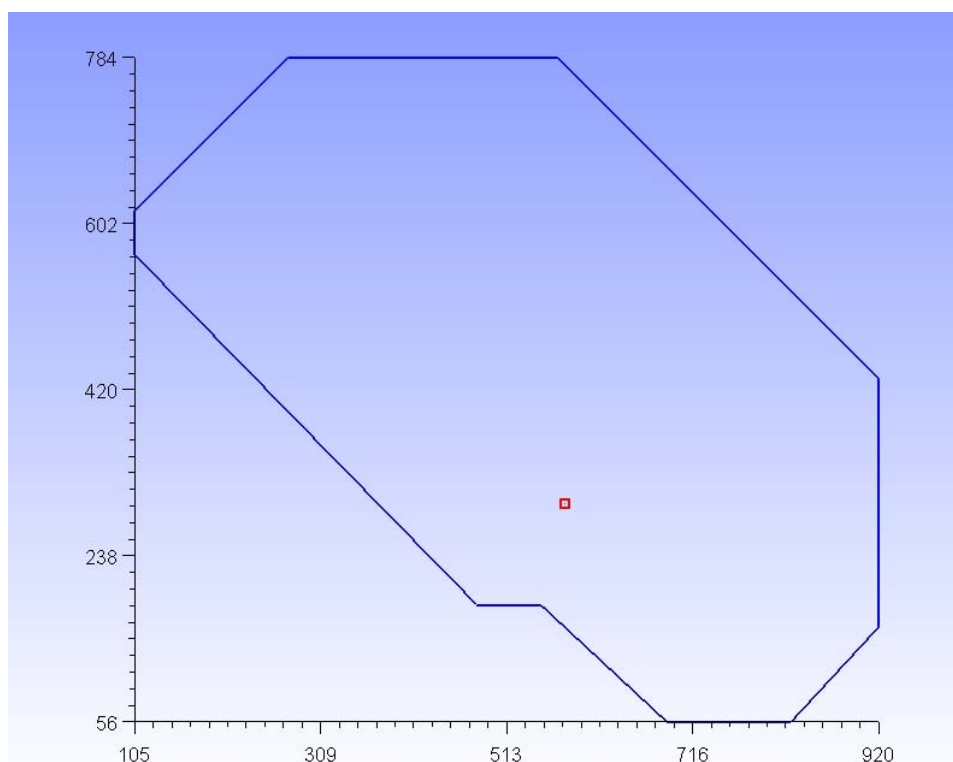
Původním záměrem bylo simulovat zásak na celé modelované lokalitě, od toho bylo ovšem upuštěno. Důvodem byly příliš velké požadavky na jemnost sítě. Monitorovací vrty, ve kterých měly být zjišťovány koncentrace nanoželeza, jsou totiž od toho aplikačního vzdáleny jen několik metrů, velikost hran elementů by tedy nesměla být o moc větší než jeden metr. Nabízela se dvě možná řešení tohoto problému. Prvním z nich bylo lokální zjemnění sítě, jež by však vyžadovalo přepracování celé geometrie, neboť hustotu uzlů sítě lze ovlivňovat jen v blízkosti bodů, které jsou v geometrii explicitně definovány. Žádný takový bod ale ve stávající geometrii v blízkosti aplikačního vrtu není. Druhým možným řešením, pro které jsem se rozhodl, bylo vytvořit geometrii novou. Ta představuje výřez geometrie staré. Zahrnuje aplikační vrt a jeho nejbližší okolí (pět metrů na každou stranu). Souřadnice aplikačního a monitorovacího vrtu a jejich parametry jsou uvedeny v Tabulce 8.

	PW-3	MW-2
<b>Typ</b>	Aplikační	Monitorovací
<b>X [m]</b>	576,8	573,4
<b>Y [m]</b>	295,7	295,6
<b>Hloubka [m]</b>	15	15
<b>Průměr [m]</b>	0,16	0,16

**Tabulka 8: Souřadnice a parametry použitých vrtů**

Z tabulky je patrné, že vrt monitorovací je od toho aplikačního vzdálený přibližně tři metry.

Na Obrázku 5.14 je znázorněno horizontální vymezení nové geometrie (červeně zvýrazněný čtverec) ve srovnání s tou starou.

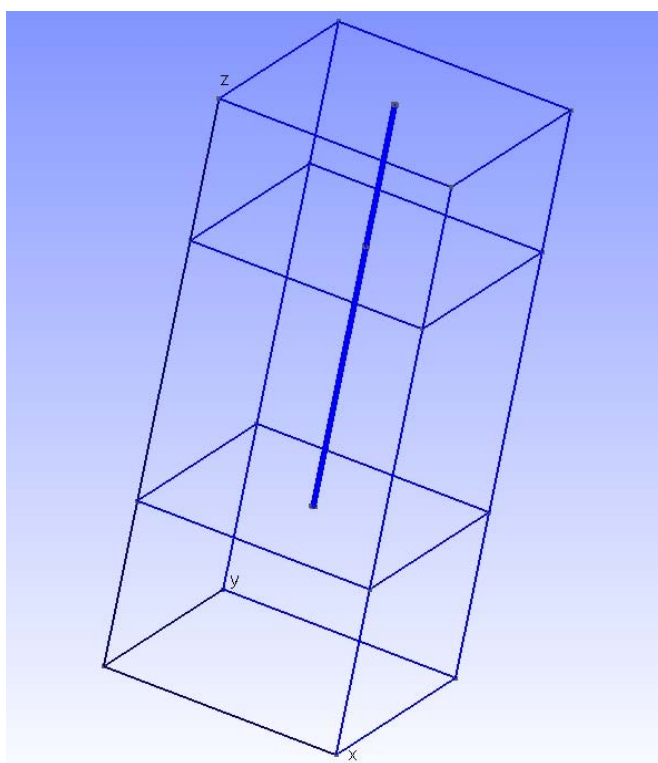


**Obrázek 5.14: Horizontální vymezení nové geometrie**

Při tvorbě geometrie jsem narazil na problém, který zde nelze nezmínit. Zatímco v [1] je hovořeno o zásaku do vrstvy B, hloubka aplikačního vrtu by odpovídala zásaku do vrstvy I1. Logičtější je samozřejmě provádět zásak do propustné vrstvy, rozhodl jsem se tedy v modelu oba výše popsané vrty o dva metry prodloužit, aby zasahovaly až do vrstvy B.

Co se vertikálního rozsahu nové geometrie týče, rozhodl jsem se omezit jen na vrstvy A, I1 a B. Důvodem, proč toto mohu udělat, aniž by přesnost modelu výrazně utrpěla, je fakt, že přetok mezi vrstvami B a C je minimální (jak je patrné z tabulky 7).

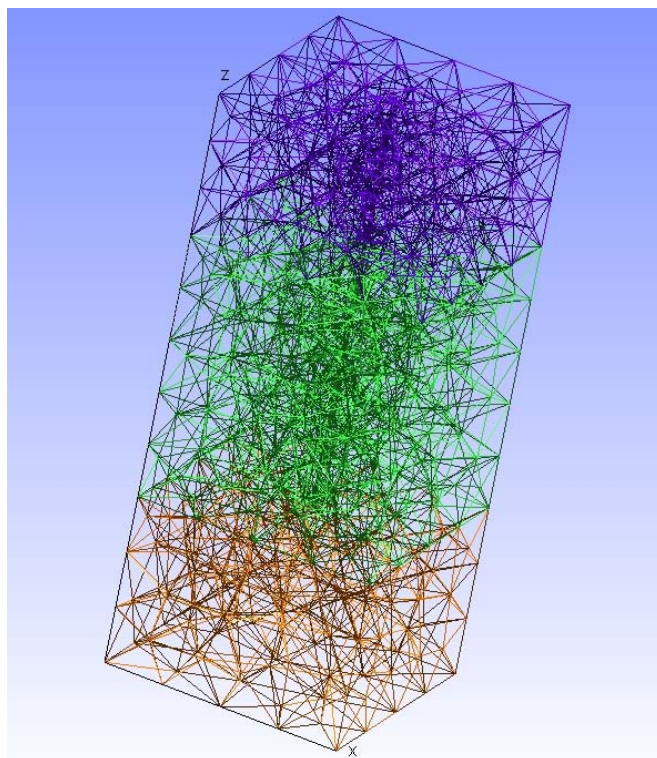
Geometrie vytvořená pro účely zásaku nanoželeza je znázorněna na Obrázku 5.15.



**Obrázek 5.15: Geometrie pro zásak**

Součástí geometrie je aplikační vrt (jako dutina) a to proto, aby šlo simulovat zásak skrze jeho dno (aby bylo na jeho dno možno zadat OKP).

Na Obrázku 5.16 je znázorněna v programu Gmsh vytvořená síť. Má 986 uzlů a 4702 elementů (všechny 3D).



**Obrázek 5.16: Síť pro zásak**

Dalším krokem byla definice okrajových podmínek pro proudění. Ty jsou shrnuty v Tabulce 9.

Hranice modelu	Typ OKP
Hrany A	Dirichletova
Hrany II	Homogenní Neumannova
Hrany B	Dirichletova
Dolní podstava	Homogenní Neumannova
Horní podstava	Neumannova
Stěny vrtu	Homogenní Neumannova
Dno vrtu	Neumannova

**Tabulka 9: Okrajové podmínky pro proudění**

Dirichletovy OKP na hranách vrstev A a B byly vytvořeny na základě proudového modelu celé oblasti. Neumannova OKP na horní podstavě modelu představuje srážky. Její hodnota je stejná jako u celkového modelu. Předpokládám dobře



vystrojený vrt, jeho stěny jsou tedy nepropustné. Hodnota OKP na dně vrtu je při jeho běžném provozu totožná s tou na horní podstavě modelu (tedy jen srážky).

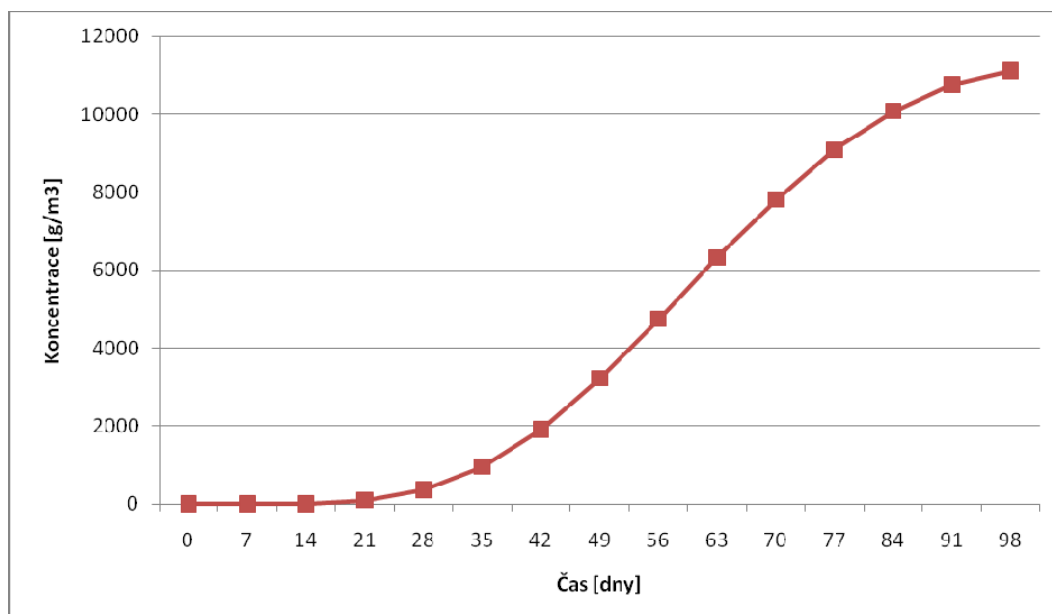
Simulace zásaku byla realizována následujícím způsobem:

1. Na dno vrtu byla nadefinována okrajová podmínka pro transport. Jednalo se o podmínku konstantní koncentrace. Její hodnota byla  $1000000 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ .
2. Byl spuštěn výpočet transportu. Čas simulace byl nastaven na 7,5 hodiny [1].
3. Hodnota Neumannovy OKP na dně vrtu byla měněna tak, aby bylo za stanovenou dobu do oblasti zasáknuto 22 kg nanoželeza. Celkové množství nanoželeza v oblasti bylo v každém kroku počítáno pomocí aplikace, kterou jsem pro tento účel zhotovil (bude, stejně jako ostatní mnou zhotovené aplikace zmíněné v tomto textu, přiložena v elektronické podobě). Při hodnotě OKP  $7 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{den}^{-1}$  bylo do oblasti zasáknuto 22627 g nanoželeza, což je dostatečně blízko hodnotě požadované.
4. Hodnoty koncentrací v jednotlivých elementech oblasti uložené ve výstupním souboru programu Flow123D (na konci simulace zásaku) byly pomocí jednoduchého programu překonvertovány na soubor počátečních podmínek transportu (\*.tic). S těmito počátečními podmínkami byla znovuspuštěna simulace, tentokrát však s normálními OKP (jen srážky na dně vrtu).

Nyní už zbývalo jediné, a sice zjistit, při jaké hodnotě retardace bude rychlost šíření nanočástic odpovídat rychlosti očekávané (1 metr za měsíc).

Pomocí programu zhotoveného k tomuto účelu byl nalezen element odpovídající svými souřadnicemi nejlépe souřadnicím monitorovacího vrtu (jeho dna). Jiný program pak vypisoval hodnoty koncentrace v daném elementu v každém časovém kroku (toto umí i některé verze Flow123D, ne však ta, kterou jsem k výpočtu používal já).

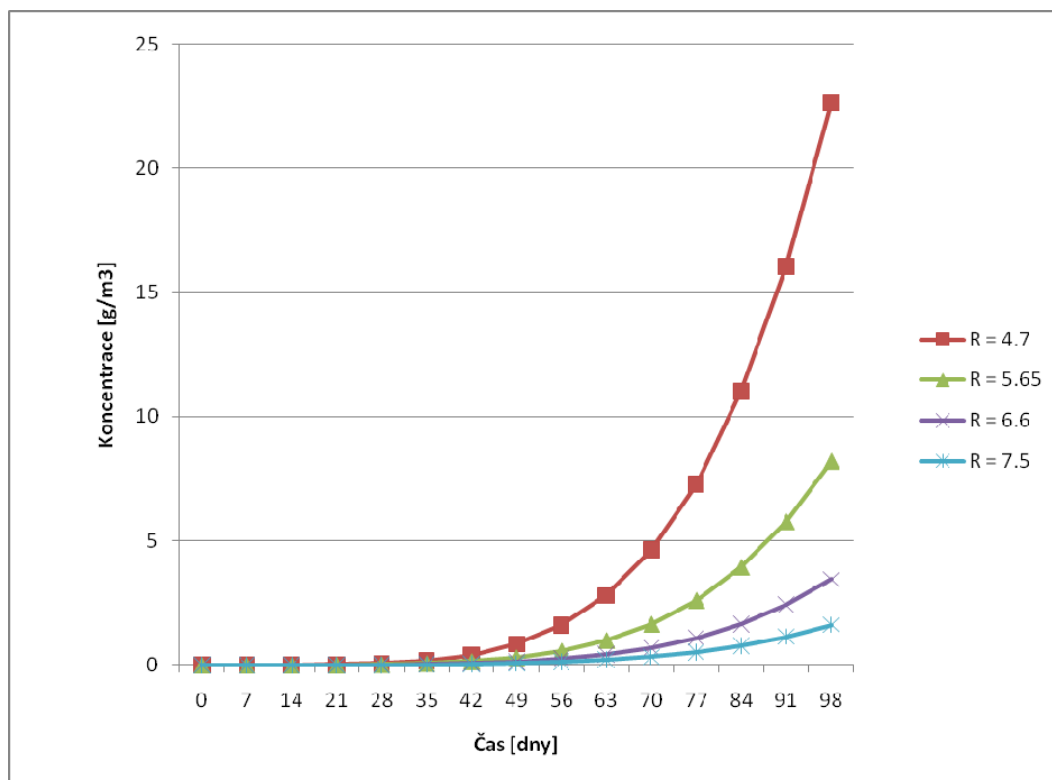
V Grafu 1 je vykreslen vývoj hodnot koncentrace v pozorovacím elementu. Hodnoty v něm vynesené vzešly ze simulace bez retardace.



**Graf 1: Koncentrace v pozorovacím elementu – bez retardace**

Retardace byla v modelu realizována pomocí lineární sorpce. Její velikost je určena hodnotou distribučního koeficientu  $k_D$ , jak je popsáno v části 2.4.5.

V Grafu 2 jsou vykresleny vývoje koncentrace v pozorovacím elementu pro jednotlivé hodnoty retardace.



**Graf 2: Koncentrace v pozorovacím elementu pro různé hodnoty retardace**

Cílem bylo, aby nanoželezo do pozorovacího elementu dorazilo po třech měsících. Toto je splněno při hodnotě retardačního koeficientu  $R = 7,5$  (koncentrace v čase  $t = 91$  dní je menší než  $1 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ , což jsem si určil za limit). Ta odpovídá bezrozměrnému distribučnímu koeficientu  $k_D = 3,5$  ( $K_D = 3,5 \text{ cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$ ,  $\rho = 1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ). V Tabulce 10 jsou uvedeny distribuční koeficienty, které byly zjištěny pomocí kolonových experimentů popsanych v [10] (druhý sloupec tabulky) a v [9] (třetí sloupec tabulky).

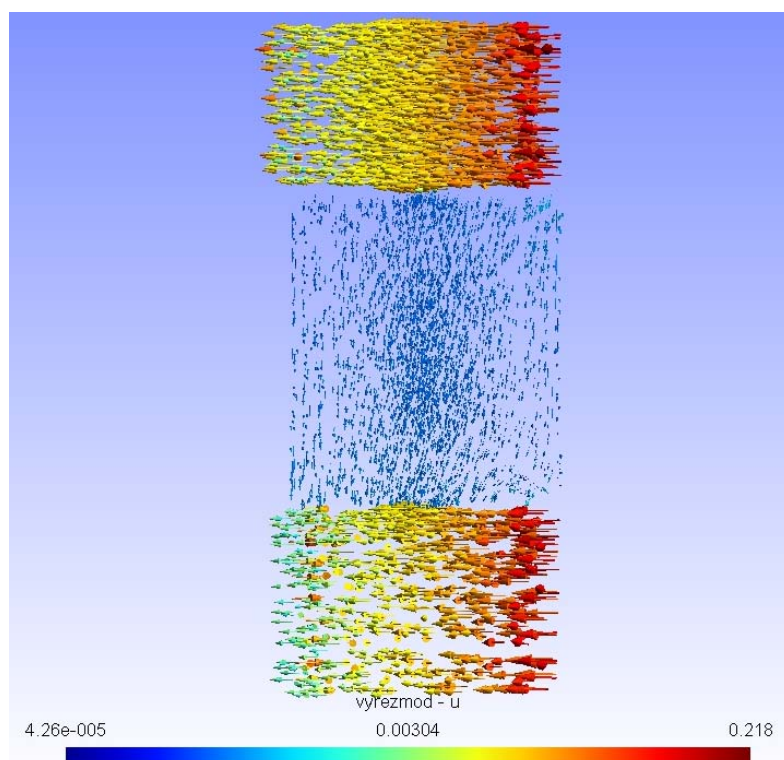
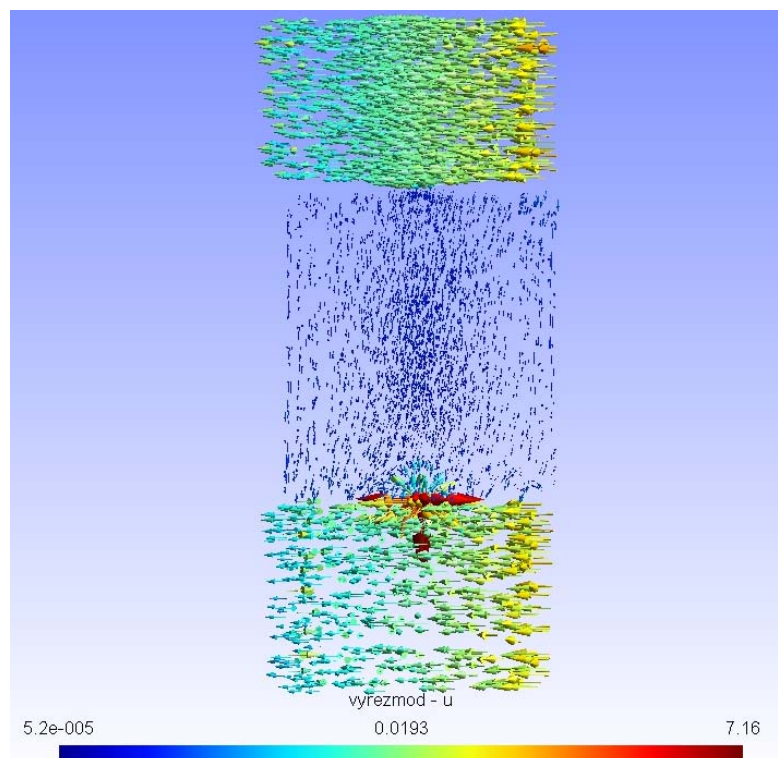
	$K_D [\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}]$	$K_D [\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}]$
Frakce I (nejjemnější)	0,032	0
Frakce II	1,76	12
Frakce III (nejhrubší)	22,7	35
Průměr	4,8	12,55

**Tabulka 10: Distribuční koeficienty z kolonových experimentů**

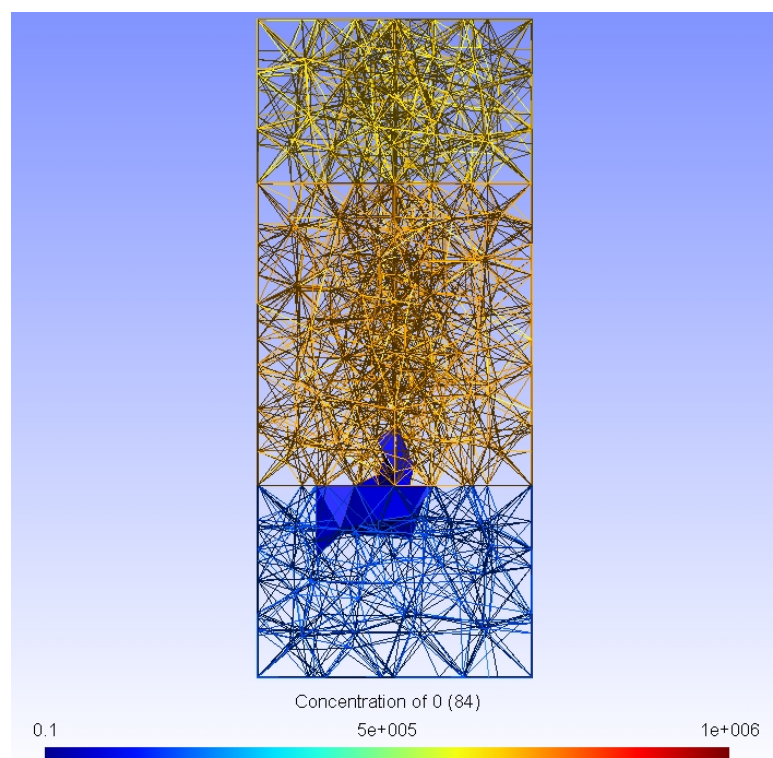
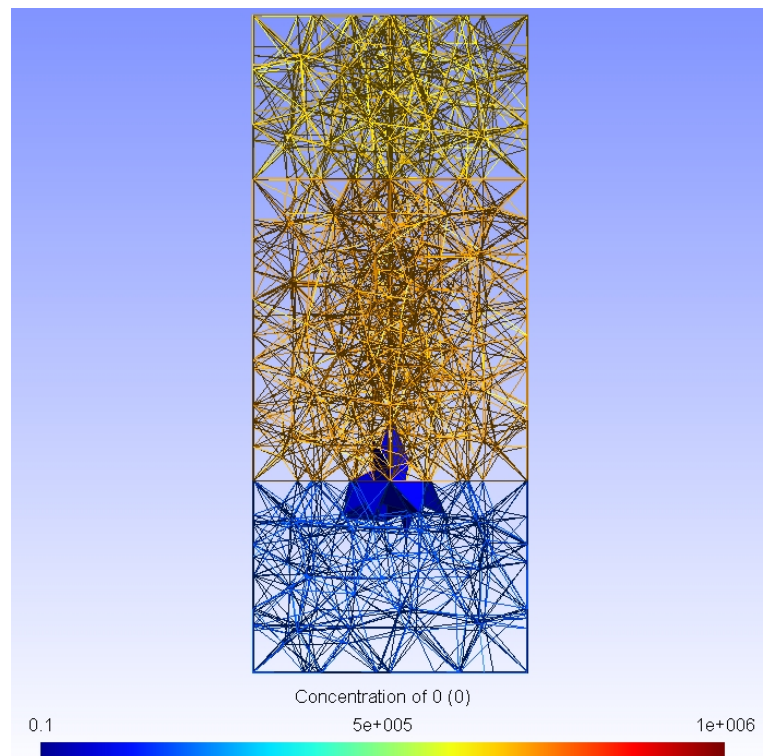
Distribuční koeficient použitý v modelu je v dobré shodě s těmi z kolonových experimentů. Rozdíl mezi nimi je způsoben odlišností hornin, ve kterých transport probíhal.

Na Obrázku 5.17 jsou znázorněny filtrační rychlosti během zásaku (nahore) a během normálního provozu vrtu. Na Obrázku 5.18 je pak znázorněno rozložení koncentrací nanoželeza po ukončení zásaku (nahore) a po třech měsících normálního provozu.

Závěrem je třeba zdůraznit, že úspěšná simulace zásaku nanoželeza popsaná v této kapitole automaticky neimplikuje vhodnost použití programu Flow123D pro podobné typy úloh. V našem případě byl totiž pozorovací vrt umístěn ve směru proudění podzemní vody od vrtu aplikačního. Převažoval tedy advektivní transport, díky čemuž se neprojevily slabiny programu Flow123D (v předchozích kapitolách již několikrát zmíněné).



**Obrázek 5.17: Filtrační rychlosti během zásaku (nahore) a během normálního provozu**



**Obrázek 5.18: Koncentrace nanoželeza po zásaku (nahore) a po třech měsících normálního provozu**

## 6. Závěr

Tato práce se zabírala popisem simulace podzemního proudění a transportu na reálné lokalitě.

V teoretické části práce byly rozebrány fyzikální veličiny popisující horninové prostředí a uvedeny vztahy pro proudění podzemní vody v saturovaném a nesaturovaném prostředí a pro transport látek v podzemní vodě rozpuštěných. Dále zde byl uveden popis simulačního software, jeho vstupních a výstupních souborů.

V úvodu praktické části je popsána simulace kolonového experimentu transportu železných nanočástic. Výstup modelu je srovnán s fotografiemi experimentu a je s nimi v dobré shodě.

Následuje popis sestavování proudového modelu reálné lokality. K tomuto účelu byla vybrána lokalita Kuřívody. Model byl kalibrován pomocí programu UCODE, jehož propojení s programem Flow123D je v textu podrobně popsáno. Shoda mezi modelem a naměřenými hodnotami je posuzována jednak vizuálně srovnáním výstupů modelu s mapami hydroizohyps a jednak statisticky. Přestože se dá shoda označit jako dobrá, bylo by možno dosáhnout zlepšení a to pomocí rozdělení jednotlivých vrstev modelu do zón o různé hydraulické vodivosti. Kalibraci parametrů by bylo možno zpřesnit přidáním většího množství pozorování.

Dále je v práci uveden popis simulace transportu kontaminace. Ta vycházela ze známého rozložení koncentrací kontaminující látky v době vyhotovení dokumentace k oblasti. Snaha replikovat tvar kontaminačních mraků však selhala. Důvodem bylo, že kontaminující látka není zcela rozpuštěna v podzemní vodě, bylo by tedy třeba modelovat vícefázové proudění. Toho však zvolený simulační software není schopen. Stejně tak neumí počítat s disperzí (vyjma numerické), což výsledek simulace také výrazně ovlivnilo.

Nakonec je v práci uveden popis simulace zásaku a šíření železných nanočástic. Geometrie celé velké oblasti byla k tomuto účelu nepoužitelná, byla tedy vytvořena nová, která je výřezem geometrie původní. Cílem bylo dosáhnout rychlosti šíření nanočástic zjištěné při zásaku na lokalitě reálně provedeném.

Tohoto cíle bylo dosaženo pomocí retardace způsobené lineární sorpcí. Hodnota distribučního koeficientu lineární sorpce se výrazně neliší od hodnot experimentálně zjištěných.

Tato práce vznikla za účelem ověření použitelnosti programu Flow123D při modelování proudění a transportu na reálné lokalitě. Jedná se o program kvalitní, který bude možno, po doplnění některých funkcionalit (především počítání disperze), použít na široké spektrum úloh podzemního proudění a transportu. Tato práce také může posloužit jako návod pro kohokoli, kdo by se budoucně zabýval simulací hydrologie reálné lokality.

## Literatura

- [1] Dokumentace ke zvolenému pilotnímu experimentu.
- [2] Hill, M.C. and Tiedeman, C.R., 2007, Effective groundwater model calibration, with analysis of sensitivities, predictions, and uncertainty: Wiley and Sons, New York, New York, 455 p.
- [3] Hokr, M.: Transportní procesy, Skripta FM TUL, 2005.
- [4] Kazda, I.: Podzemní hydraulika v ekologických a inženýrských aplikacích, Academia, 1997.
- [5] Kopal, J.: Modelování transportu radionuklidů obsažených v granitové vodě v heterogenním horninovém prostředí, diplomová práce NTI TUL, 2008.
- [6] Královcová, J.: Model proudění podzemních vod v rozpukaném porézním prostředí a jeho aplikace, habilitační práce FM TUL, 2007.
- [7] Krásný, J., Daňková, H., Hanzel, V., Kněžek, M., Matuška, M., Šuba, J.: Mapa odtoku podzemní vody ČSSR 1:1000000. Český hydrometeorologický ústav. Praha, 1981.
- [8] Krčmář, B. (1990): The form of capture of molecular form of elements in atmospheric air emitted by geological structures. Autorské osvědčení č.268 641. Praha 31.08.90. Int. Clas G 01 v 9/00.
- [9] Nosek, J.: Laboratorní výzkum a modelování transportních vlastností nanoželeza, disertační práce FM TUL, 2009.
- [10] Pelikánová, D.: Model agregace nanočástic, diplomová práce NTI TUL, 2008.
- [11] Poeter, E.P., Hill, M.C., Banta, E.R., Mehl, Steffen, and Christensen, Steen, 2005, UCODE\_2005 and Six Other Computer Codes for Universal Sensitivity Analysis, Calibration, and Uncertainty Evaluation: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A11, 283p.



- [12] Rektorys, K. a spolupracovníci: Přehled užití matematiky, Prometheus, 2003.
- [13] Říha, J.: Simulace reakčního transportu v reálné lokalitě, Semestrální projekt, 2009.
- [14] Severýn, O., Hokr, M., Královcová, J., Kopal, J., Tauchman, M.: Flow123D: Numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum, Technical report, TU Liberec, 2008.
- [15] Šembera, J., Maryška, J., Královcová, J., Severýn, O.: 10. A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium, Kybernetika (2007), Vol. 43/4, str. 577-588. ISSN 0023-5954
- [16] <http://www.geotrend.cz/>